



Résolution numérique du modèle de Boltzmann avec énergies internes de rotation et de vibration

François Mallinger, S. Gimelshein

► To cite this version:

François Mallinger, S. Gimelshein. Résolution numérique du modèle de Boltzmann avec énergies internes de rotation et de vibration. [Rapport de recherche] RR-3159, INRIA. 1997. inria-00073530

HAL Id: inria-00073530

<https://inria.hal.science/inria-00073530>

Submitted on 24 May 2006

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

***Résolution numérique du modèle de Boltzmann
avec énergies internes de rotation et de vibration***

F. Mallinger, S. Gimelshein

N° 3159

Avril 1997

_____ THÈME 4 _____



***apport
de recherche***

Résolution numérique du modèle de Boltzmann avec énergies internes de rotation et de vibration

F. Mallinger, S. Gimelshein

Thème 4 —
Projet M3N

Rapport de recherche n° 3159 — Avril 1997 — 56 pages

Résumé : Nous présentons le solveur Boltzmann développé à l'INRIA. En particulier nous rappelons l'approximation numérique utilisée ainsi que l'algorithme implémenté. Pour calculer des écoulements à hautes températures nous avons implémenté un nouveau modèle de collision, introduit par le groupe du Pr. Ivanov de l'ITAM, qui tient compte des échanges d'énergie internes de type VT et VV entre particules.

Mots-clé : Boltzmann, methode DSMC, collisions inélastiques, vibrations.

(Abstract: pto)

Numerical computation of Boltzmann equation with rotational and vibrational internal energies

Abstract: We present in this report the numerical solution techniques of the Boltzmann gas kinetic equation developed at INRIA. In particular, we describe the numerical approximation and the implemented algorithm. To compute high temperature flows we have implemented a new collision model for VT and VV energy exchanges. This model was developed at ITAM by the team of Pr. M. Ivanov.

Key-words: Boltzmann, DSMC method, inelastic collisions, vibrations.

Table des matières

1	Introduction	4
2	Le modèle cinétique de Boltzmann	4
2.1	L'équation de Boltzmann	4
2.2	Propriétés	7
3	Approximation de l'équation de Boltzmann	8
4	Le solveur Boltzmann	10
4.1	L'algorithme numérique	10
4.1.1	L'algorithme	10
4.1.2	Le maillage	11
4.1.3	Définition cinétique de ρ, u, T	12
4.2	Probabilité de collision: le modèle VHS	13
4.3	Echange d'énergie T-R dans une collision inélastique: le modèle Borgnakke-Larsen	14
4.4	Les conditions aux limites	17
4.4.1	Conditions sur le corps	17
4.4.2	Conditions à l'infini	17
5	Modélisation des phénomènes vibratoires	19
5.1	Le modèle de l'oscillateur harmonique	19
5.2	Le modèle de l'oscillateur non harmonique	20
5.3	Distribution de Boltzmann- Energie moyenne de vibration	20
6	Probabilité d'échange d'énergie VT et probabilité de transition	21
6.1	Implémentation	24
6.2	Conditions initiales et aux limites- calcul de la température	26
6.3	Résultats numériques	27
7	Probabilité d'échange d'énergie VV et probabilité de transition	41
7.1	Implémentation	43
7.2	Résultats numériques	46
8	Conclusion	52
	Annexe	54

1 Introduction

Tant pour le domaine civil que militaire, de nombreux groupes de recherche, de part le monde, se sont intéressés aux calculs d'écoulements externes à grande vitesse en milieux raréfiés. De telles simulations étaient nécessaires pour le calcul des coefficients aérodynamiques et des flux de chaleur pour des missiles balistiques, ou plus récemment, dans le domaine civil, pour de la navette spatiale Hermes.

Les écoulements raréfiés sont modélisés par l'équation de Boltzmann, résolue numériquement par des méthodes, maintenant classiques, de type Monte-Carlo. Le gaz est alors représenté par un ensemble de particules. A partir de modèles phénoménologiques, déduits de la théorie cinétique et de la mécanique statistique, le déplacement et l'interaction des molécules sont simulés. Les écoulements qui nous intéressent peuvent présenter de forts déséquilibres thermiques dus à des forts gradients ou à des taux de raréfaction importants.

Dans ce papier, nous présentons les modèles d'échange d'énergies que nous utilisons dans notre solveur Boltzmann pour la prise en compte des déséquilibres thermiques. Dans la section 2 nous rappelons le modèle Boltzmann, écrit pour un gaz polyatomique constitué d'une seule espèce et prenant en compte les énergies internes des molécules. Dans la section 3 nous présentons l'approximation numérique de l'équation de Boltzmann que nous utilisons; la section 4 étant consacrée à l'implémentation de l'algorithme qui en résulte. Nous préciserons en particulier les probabilités de collision, calculées à partir du modèle VHS d'interaction moléculaire, ainsi que le modèle d'échange d'énergie de Borgnakke-Larsen. Dans la section 5, après quelques rappels de résultats élémentaires de mécanique statistique, nous présentons le modèle d'échange d'énergie T-V (translation - vibration) que nous avons implémenté, modèle dû au groupe de recherche du Pr. Ivanov de l'ITAM. Enfin différents résultats numériques valident l'implémentation de ce modèle dans notre code. Ce travail a été réalisé dans le cadre d'un contract DRET.

2 Le modèle cinétique de Boltzmann

2.1 L'équation de Boltzmann

Dans le modèle de Boltzmann le gaz est observé d'un point de vue statistique. L'état du gaz est décrit par une fonction de distribution f qui dépend de grandeurs microscopiques attachées aux particules. Ainsi, pour un gaz monoatomique, la fonction $f = f(x, \xi, t)$ dépend de la position des particules, de leur vitesse et du temps. Plus précisément elle exprime le nombre le plus probable des particules se trouvant dans le volume élémentaire $(dx, d\xi)$ autour du point (x, ξ) à l'instant t . Nous renvoyons à [7], [8], [9], [17] ou encore à [23] pour une présentation détaillée du modèle monoatomique. Dans cette section nous présentons un modèle plus sophistiqué permettant de décrire des gaz polyatomiques constitués d'une seule espèce. Il est donc nécessaire d'introduire une variable supplémentaire prenant en compte les phénomènes liés à la structure polyatomique des particules. Dans le modèle qui suit, nous introduisons la variable I associée à l'énergie interne d'une particule, e_m , par la relation $I^2 = e_m$. Dans ce cas la fonction de distribution s'écrit $f = f(x, v, I, t)$. La loi d'état induite à l'équilibre devient $p = (\gamma - 1) \rho e_m$, où la valeur de γ peut être choisie dans tout l'intervalle $(1, 5/3]$. Elle est liée au paramètre δ , le nombre

de degré de liberté internes supplémentaires de la molécule, par la relation suivante

$$\gamma = \frac{\delta + 5}{\delta + 3}.$$

L'équation de Boltzmann s'écrit dans ce cas général

$$(1) \quad \frac{\partial f}{\partial t} + \xi \cdot \frac{\partial f}{\partial x} = Q_\delta(f),$$

où Q_δ représente le terme de collision, quadratique en f , qui dépend du modèle choisi. Ce modèle présente l'avantage de n'introduire qu'une variable supplémentaire pour d'écrire les énergies internes ayant un spectre continu. Nous rappelons ici les deux modèles présentés dans [5]. Le premier se déduit d'un modèle monoatomique en dimension supérieure à trois. Le second, que nous retiendrons, est le modèle de Borgnakke-Larsen.

Nous décrivons dans la suite de ce paragraphe la collision de deux particules et nous présentons le terme de collision. Deux molécules de vitesses et d'énergies internes (ξ, I) et (ξ_*, I_*) , avant collision, auront après collision respectivement les vitesses et énergies internes (ξ', I') et (ξ'_*, I'_*) . De plus nous noterons la vitesse relative (avant collision) des deux molécules par

$$(2) \quad v_r = \xi - \xi_*,$$

et l'énergie totale du système par

$$(3) \quad e^2 = \frac{|\xi - \xi_*|^2}{4} + I^2 + I_*^2.$$

Les quantités primées, obtenues après une collision, se déduisent du système suivant

$$(4) \quad \begin{cases} \xi' + \xi'_* = \xi + \xi_*, \\ v'_r = \frac{2eR}{|v_r|} (v_r - 2v_r \cdot \omega \omega), \\ I'^2 = r(1 - R^2) e^2, \\ I'^2_* = (1 - r)(1 - R^2) e^2. \end{cases}$$

Les paramètres r et R mesurent les échanges d'énergie cinétique et d'énergie interne et le vecteur ω désigne un élément de la sphère unité. Ces paramètres de la collision sont des éléments quelconques de l'intervalle $[0, 1]$ et de la sphère unité, respectivement.

En complément à ces relations, nous adjoignons les relations suivantes, utiles pour la suite

$$\begin{aligned} I^2 + I_*^2 &= (1 - R'^2) e^2, \\ I^2 &= r'(1 - R'^2) e^2. \end{aligned}$$

Pour ce modèle le terme de collision s'écrit alors

$$(5) \quad \begin{cases} Q_\delta(f) = \int_{\Delta} \left(\frac{f' f'_*}{(I' I'_*)^{\delta-1}} - \frac{f f_*}{(I I_*)^{\delta-1}} \right) B(I I_*)^{\delta-1} \\ \quad d\xi_* dI_* \varphi_\delta(r) dr \psi_\delta(R) dR d\omega, \end{cases}$$

avec

$$\Delta = IR^3 \times IR^+ \times [0, 1]^2 \times S^2,$$

$$\varphi_\delta(r) = [r(1-r)]^{\delta/2-1},$$

$$\psi_\delta(R) = R^2(1-R^2)^{\delta-1},$$

$$B = B(e, R|v_r|, R|v_r \cdot \omega|, I^2 r(1-R^2), I_*^2(1-r)(1-R^2), (1-R^2)(I^2 + I_*^2)) > 0.$$

Nous avons utilisé la notation classique $f = f(\xi, I)$, $f_* = f(\xi_*, I_*)$, $f' = f(\xi', I')$ et $f'_* = f(\xi'_*, I'_*)$. Les arguments du noyau de collision B sont des invariants collisionnels (même définition qu'en monoatomique). En particulier l'énergie totale est conservée dans le choc. L'énergie cinétique seule n'est plus conservée car ce type de collision autorise un échange entre énergie cinétique et énergie interne. La collision est décrite sur la figure (1), et correspond aux formules (4).

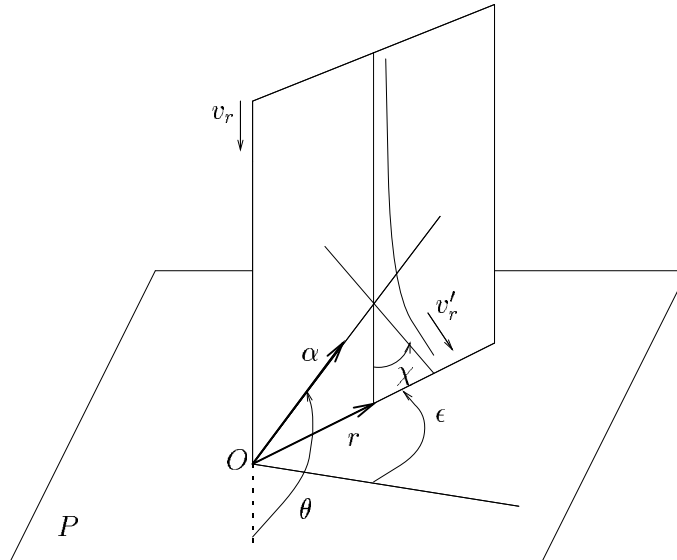


FIG. 1 - Schéma d'une collision

Comme cas particulier, le modèle “Variable Hard Sphere” (VHS), est obtenu en posant

$$B = C |v_r|^{2\alpha} |v_r \cdot \omega| R^{1+2\alpha},$$

où C est une constante, et conduit à la loi de viscosité suivante

$$\mu = K T^{1/2-\alpha},$$

où K est une constante.

2.2 Propriétés

Toutes les propriétés que nous rappelons dans cette partie sont démontrées dans Bourgat et al. [5].

Microréversibilité

Nous définissons l'opérateur de collision T_ω , pour les paramètres ω fixés, par

$$T_\omega(\xi, \xi_*, I, I_*, r, R) = (\xi', \xi'_*, I', I'_*, r', R').$$

Malgré la non linéarité de l'opérateur T_ω , on démontre les propriétés suivantes de symétrie et d'inversibilité de T_ω , pour tout $\omega \in S^2$,

$$(i) \quad T_\omega \circ T_\omega = Id,$$

$$(ii) \quad e' = e, \quad R'|v'_r| = R|v_r|, \quad R'v'_r \cdot \omega = -Rv_r \cdot \omega,$$

$$I'^2 r'(1 - R'^2) = I^2 r(1 - R^2), \quad I'^2_*(1 - r')(1 - R'^2) = I^2_*(1 - r)(1 - R^2),$$

$$(1 - R'^2)(I'^2 + I'^2_*) = (1 - R^2)(I^2 + I^2_*),$$

$$(1 - R^2)(I^2(1 - r) + rI^2_*) = -(1 - R'^2)(I'^2(1 - r') + r'I'^2_*),$$

$$(iii) \quad T_\omega(\xi_*, \xi, I_*, I, 1 - r, R) = (\xi'_*, \xi', I'_*, I', 1 - r', R').$$

Rappelons, pour la propriété suivante, qu'un invariant collisionnel est une fonction ϕ qui vérifie $\phi + \phi_* = \phi' + \phi'_*$. Alors,

(iv) les invariants collisionnels sont donnés par

$$\phi(\xi, I) = \nu + \zeta \cdot \xi + \mu \left(\frac{|\xi|^2}{2} + I^2 \right),$$

où $\mu, \nu \in \mathbb{R}$ et $\zeta \in \mathbb{R}^3$ sont des constantes.

Mesure invariante

Pour tout noyau de collision B , défini comme précédemment, et pour tout $\delta > 0$, nous définissons la mesure invariante dans le processus de collision

$$(6) \quad d\sigma = B(II)^{\delta-1} \varphi_\delta(r) \psi_\delta(R) d\xi d\xi_* dIdI_* drdR.$$

Théorème H Des résultats précédents, nous déduisons les propriétés suivantes

$$(i) \quad \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+} Q_\delta(f)(\xi, I) \phi(\xi, I) d\xi dI = \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+} Q_\delta(f)[\phi + \phi_* - \phi' - \phi'_*] d\xi dI,$$

$$(ii) \quad \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+} Q_\delta(f)(\log(fI^{1-\delta}) + 1) d\xi dI,$$

$$Q_\delta(f_0) = 0 \text{ si et seulement si } f_0 = \lambda_\delta \frac{\rho I^{\delta-1}}{(R_g T)^{(3+\delta)/2}} \exp\left(-\frac{|\xi - u|^2 + 2I^2}{2R_g T}\right),$$

avec $\rho, T \in \mathbb{R}_+$ et $u \in \mathbb{R}^3$ définis par

$$\int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+} (1, \xi, (\xi - u)_i (\xi - u)_j, I^2) f_0 d\xi dI = (\rho, \rho u, \rho T \delta_{ij}, \rho(\delta/2)T).$$

3 Approximation de l'équation de Boltzmann

Nous utilisons une méthode particulière proposée par Nanbu [20], [21] et développée, d'un point de vue mathématique, par Babovsky [1]. Ces deux auteurs ne considèrent des gaz monoatomiques. Une généralisation aux gaz polyatomiques est décrite dans [5]. Nous en donnons les grandes lignes ici.

Cette méthode repose sur un découplage de l'opérateur de transport et de collision. Ainsi pour chaque pas de temps nous résolvons successivement la phase de transport libre

$$(7) \quad \begin{cases} \frac{\partial f}{\partial t} + \xi \cdot \frac{\partial f}{\partial x} = 0, \\ f(t_n) = f_n, \end{cases}$$

puis nous résolvons la phase de collision, ie. l'équation homogène suivante

$$(8) \quad \begin{cases} \frac{\partial f}{\partial t} - Q_\delta(f, f) = 0, \\ f(t_n) = f_n^{tl}, \end{cases}$$

avec comme condition initiale la solution f_n^{tl} de l'étape précédente de transport libre.

L'approximation particulière conduit à chercher la solution f de l'équation cinétique sous la forme d'une somme de masse de Dirac

$$(9) \quad f(t, x, \xi, I) = \frac{1}{n_\infty} \sum_{i=1}^N \delta(x - x_i(t)) \delta(\xi - \xi_i(t)) \delta(I - I_i(t)),$$

où N est le nombre total de particules et $x_i(t)$, $\xi_i(t)$, $I_i(t)$ la position et la vitesse et l'énergie interne de la particule i au temps t .

La phase de transport libre se résout sans difficulté particulière. Durant cette phase, seules les positions des particules sont modifiées, les vitesses et énergies internes des particules restant inchangées. Ainsi, pour un pas de temps de transport libre Δ_{tl} fixé, la résolution de (7) donne

$$\begin{cases} x_i(t + \Delta_{tl}) = x_i(t) + \Delta_{tl} \xi_i(t) \\ \xi_i(t + \Delta_{tl}) = \xi_i(t) \\ I_i(t + \Delta_{tl}) = I_i(t). \end{cases}$$

L'originalité de la méthode réside bien sur dans la résolution de la phase de collision. Pour cette étape, le domaine de calcul est recouvert par une grille régulière constituée de cellules rectangulaires C_j . Dans chaque cellule C_j nous résolvons l'équation homogène (8) complétée par la condition initiale suivante

$$(10) \quad f(\xi, I, t=0)_{/C_j} = \frac{1}{n_\infty} \sum_i \delta(\xi - \xi_i(0)) \delta(I - I_i(0)).$$

Comme l'opérateur de collision est une mesure, nous introduisons une formulation faible de l'équation (8). Ainsi, pour une fonction continue g , nous écrivons

$$(11) \quad \begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle f(t), g \rangle &= \langle Q_\delta(f, f), g \rangle \\ &= \frac{1}{2} \int f f_*(g' + g'_*) B dm - \frac{1}{2} \int f f_*(g + g_*) B dm, \end{aligned}$$

où nous avons utilisé les notations

$$\langle f, g \rangle = \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+} f(\xi, I) g(\xi, I) d\xi dI,$$

et

$$dm = d\xi d\xi_* dI dI_* \varphi_\delta \psi_\delta dr dR d\omega.$$

L'écriture précédente résulte des propriétés de l'opérateur de collision et en particulier de la microréversibilité des collisions individuelles. Elle reste valable même si f est représentée par une somme de distribution de Dirac.

Dans le membre de droite de (11), le deuxième terme de la somme est un terme de perte et s'écrit simplement

$$(12) \quad \frac{1}{2} \int f f_*(g + g_*) B dm = \frac{1}{2n_\infty^2} \sum_{i \neq j} [g(\xi_i, I_i) + g(\xi_j, I_j)] W_{\xi_i, \xi_j},$$

où le poids W_{ξ_i, ξ_j} est donné par

$$W_{\xi_i, \xi_j} = \int B \varphi_\delta \psi_\delta dr dR d\omega.$$

Le terme de gain, ie. le premier terme du membre de droite de (11), s'écrit

$$(13) \quad \begin{aligned} \frac{1}{2} \int f f_*(g' + g'_*) B dm &= \\ &= \frac{1}{2n_\infty^2} \sum_{i \neq j} \int [g(\xi'_i, I'_i) + g(\xi'_j, I'_j)] B \varphi_\delta \psi_\delta dr dR d\omega, \end{aligned}$$

où $\xi'_i, \xi'_j, I'_i, I'_j$ sont les vitesses et énergies internes des particules après collision. Elles sont déterminées à partir de (ξ_i, I_i) avec (ξ_j, I_j) par les formules (4).

L'équation (8) est alors intégrée en temps de la manière suivante.

- Nous remplaçons les doubles sommes dans (12) et (13) par un choix aléatoire de $N/2$ paires de particules

$$\sigma = \{(\xi_1, I_1), (\xi_{*1}, I_{*1})\}, \{(\xi_2, I_2), (\xi_{*2}, I_{*2})\}, \dots \{(\xi_{N/2}, I_{N/2}), (\xi_{*N/2}, I_{*N/2})\}.$$

- Nous discrétisons en temps l'équation (8) par un schéma d'Euler explicite

$$\begin{aligned} \langle f^{n+1}, g \rangle &= \langle f^n, g \rangle + \Delta t [\text{source- scattering}] \\ &= \frac{1}{n_\infty} \sum_{i=1}^{N/2} [g(\xi_i, I_i) + g(\xi_{*i}, I_{*i})] \left(1 - \frac{N-1}{n_\infty} \Delta t W_{\xi_i, \xi_{*i}}\right) \\ &\quad + \frac{N-1}{n_\infty} \Delta t \int [\varphi(\xi'_i, I'_i) + \varphi(\xi'_{*i}, I'_{*i})] B_i \varphi_\delta \psi_\delta dr dR d\omega. \end{aligned}$$

- En supposant que $\varphi_\delta(r)\psi_\delta(R)drdRd\omega$, est normalisée, de telle sorte que ce soit une mesure de probabilité sur $[0, 1]^2 \times S^2$, nous utilisons les identités suivantes

$$\frac{N-1}{n_\infty} \Delta t B_i = \int 1_{[0 \leq s \leq (N-1)/n_\infty B_i \Delta t]} ds,$$

$$1 - \frac{N-1}{n_\infty} \Delta t W_{\xi_i, \xi_{*i}} = \int \int 1_{[(N-1)/n_\infty B_i \Delta t \leq s \leq 1]} ds \varphi_\delta \psi_\delta drdRd\omega,$$

- puis nous calculons toutes les intégrales par une méthode de Monte-Carlo.

En pratique, le choix des $N/2$ paires étant réalisé, pour chaque paire nous tirons de manière aléatoire les nombres r, R, ω selon la loi $\varphi_\delta \psi_\delta drdRd\omega$, et $s_i \in (0, 1)$ selon une loi uniforme. Ainsi, si $s_i \leq \frac{N-1}{n_\infty} \Delta t B_i$, le terme de gain $1 - \frac{N-1}{n_\infty} \Delta t W_{\xi_i, \xi_{*i}}$ vaut zéro, et le terme de perte $\frac{N-1}{n_\infty} \Delta t B_i$ est égal à un, et par conséquent le processus de collision consiste à remplacer les particules de vitesses et d'énergies $(\xi, I)_i, (\xi_*, I_*)_i$, par $(\xi', I')_i, (\xi'_*, I'_*)_i$ calculés à partir des paramètres de collision r, R, ω . Sinon, les vitesses et énergies des particules de la paire restent inchangées. Ainsi, le résultat final est donné par

$$f^{n+1} = \frac{1}{n_\infty} \sum_{i \in I_1} \{ \delta((\xi, I) - (\xi_i, I_i)) + \delta((\xi, I) - (\xi_{*i}, I_{*i})) \}$$

$$+ \frac{1}{n_\infty} \sum_{i \notin I_1} \{ \delta((\xi, I) - (\xi'_i, I'_i)) + \delta((\xi, I) - (\xi'_{*i}, I'_{*i})) \},$$

où I_1 est l'ensemble suivant

$$I_1 = \{i, 1 \leq i \leq N/2, s_i > \frac{N-1}{n_\infty} \Delta t B_i\}.$$

La complexité de l'algorithme est en $O(N)$. De plus, par construction, cet algorithme conserve exactement la masse, la quantité de mouvement et l'énergie.

4 Le solveur Boltzmann

Dans cette section nous présentons le solveur Boltzmann pour un gaz diatomique avec énergie interne de rotation. Nous précisons les modifications apportées pour la prise en compte de l'énergie interne de vibration dans la suite. Dans cette section la notation e_m désigne toujours une énergie interne de rotation.

4.1 L'algorithme numérique

4.1.1 L'algorithme

L'algorithme correspond à la méthode numérique décrite dans la section précédente. Il consiste donc à résoudre pour chaque pas de temps l'étape de transport libre

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial t} + \xi \cdot \frac{\partial f}{\partial x} = 0, \\ f_{ti}^{n+1} = f_c^n, \end{cases}$$

puis l'étape de collision

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial t} + Q_\delta(f, f) = 0, \\ f_c^{n+1} = f_{tl}^{n+1}. \end{cases}$$

L'implémentation de l'algorithme se formule de la manière suivante:

– **Initialisation**

Définition d'une distribution initiale de particules (position, vitesse, énergie interne).

– **Itérations en temps**

- Génération de particules dans la couche de cellules frontières le long de la frontière extérieure du domaine de calcul,
- Déplacement des particules par transport libre,
- Réflexion des particules qui rencontrent la paroi,
- Elimination des particules qui sortent du domaine de calcul,
- Collisions des particules d'une même cellule,
- Calcul des moyennes quand la solution devient stationnaire,

– **Test d'arrêt**

Après un nombre suffisant de pas de temps pour le calcul des moyennes.

4.1.2 Le maillage

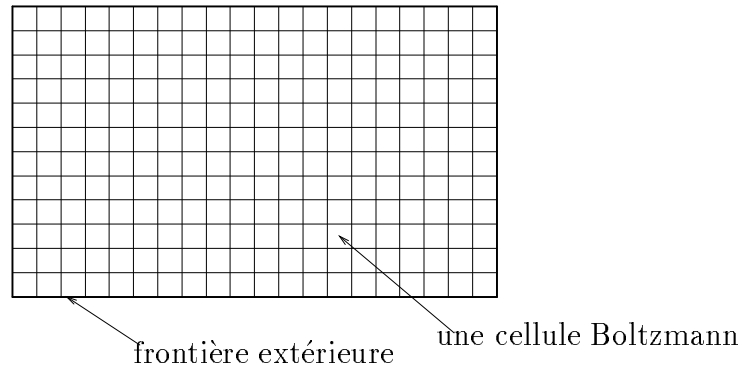


FIG. 2 - *Maillage Boltzmann de référence*

Le domaine de calcul est un rectangle de côtés parallèles aux axes. Il est maillé par des cellules rectangulaires identiques et sa frontière extérieure coïncide avec des bords de cellules (fig: 2). Ce maillage est appelé “maillage de référence”. Dans chacune de ces cellules de référence, le gaz étant représenté par un nombre fini de particules, nous pouvons calculer par des moyennes les grandeurs physiques qui nous intéressent, à savoir ; la densité ρ , la vitesse moyenne u , la température moyenne T ...

A chaque pas de temps, de l'étape de collisions, si le nombre de particules contenues dans une cellule de référence dépasse un nombre seuil fixé, alors la cellule est subdivisée en deux cellules identiques et ainsi de suite jusqu'à ce que le nombre de particules soit inférieur au nombre seuil donné. Le maillage résultant est appelé "maillage des collisions". Le maillage de collision est généré pour assurer l'homogénéité du gaz pour résoudre les collisions.

4.1.3 Définition cinétique de ρ, u, T

On calcule ρ, u, T dans chaque cellule du maillage de référence par des moyennes. Pour une cellule C , désignons par Vol son volume, par N le nombre de particules dans C et par m la masse d'une particule. Alors, pour un gaz avec énergie interne de rotation, nous écrivons,

$$\begin{aligned}\rho &= \frac{mN}{Vol}, \\ u &= \frac{1}{N} \sum_{i \in C} \xi_i, \\ T_{tr} &= \frac{2}{3R_g} \left[\left(\frac{1}{N} \sum_{i \in C} \frac{|\xi_i|^2}{2} \right) - \frac{|u|^2}{2} \right], \\ T_{rot} &= \frac{2}{N_{rot} R_g} \left(\frac{1}{N} \sum_{i \in C} e_{mi} \right), \\ T &= \frac{3T_{tr} + N_{rot} T_{rot}}{3 + N_{rot}},\end{aligned}$$

où N_{rot} représente le nombre de degrés de liberté internes de rotation. En pratique ces moyennes sont trop bruitées et changent de façon sensible d'un pas de temps à l'autre. Il est donc nécessaire de faire des moyennes sur plusieurs pas de temps, c'est-à-dire des moyennes en espace-temps. Si nous désignons par K le nombre de pas de temps utilisés pour calculer les moyennes en temps et par N_k le nombre de particules contenues dans la cellule C au k^{ieme} pas de temps, alors les nouvelles formules sont données par

$$\begin{aligned}\rho &= \frac{m}{K Vol} \sum_{k=1}^K N_k, \\ u &= \frac{1}{N_K} \sum_{k=1}^K \sum_{i \in C} \xi_i, \\ T_{tr} &= \frac{2}{3R_g} \left[\frac{1}{N_K} \left(\sum_{k=1}^K \sum_{i \in C} \frac{|\xi_i|^2}{2} \right) - \frac{|u|^2}{2} \right], \\ T_{rot} &= \frac{2}{N_{rot} R_g} \left[\sum_{k=1}^K \sum_{i \in C} \frac{e_{mi}}{N_K} \right],\end{aligned}$$

où

$$N_K = \sum_{k=1}^K N_k.$$

4.2 Probabilité de collision: le modèle VHS

Pour le modèle **VHS** (Variable Hard Sphere), la section efficace de collision B est proportionnelle à une puissance de la vitesse relative des deux particules avant le choc et est donnée par

$$B(\xi - \xi_*, \alpha) = \gamma \cos(\theta) |\xi - \xi_*|^{1-2\alpha},$$

$$\theta = \text{angle}(\xi - \xi_*, \alpha).$$

Si on pose $\omega = \frac{1}{2} + \alpha$, ce modèle conduit à la limite fluide à une viscosité de la forme $\mu = K T^\omega$.

Dans chaque cellule du maillage des collisions, on simule des collisions en appariant, selon une loi de probabilité uniforme, des couples de particules. Alors, pour chaque paire de particules (ξ_i, ξ_{*i}) , une collision a lieu selon la probabilité

$$B_i = \Delta t^r \frac{N_c - 1}{N_{\infty}} \frac{2^{1/2+\alpha}}{\sqrt{2} \Gamma(3/2 - \alpha)} |\xi_i^r - \xi_{*i}^r|^{1-2\alpha},$$

où

r représente des grandeurs adimensionnées,

$$L^r = \frac{L}{MFP_\infty},$$

$$t^r = \frac{\sqrt{2RT_\infty}}{MFP_\infty} t,$$

$$\xi^r = \frac{\xi}{\sqrt{2RT_\infty}},$$

N_c le nombre de particules de la cellule considérée,
 N_{∞} le nombre de particules que contiendrait la même cellule à l'infini.
 MFP_∞ le libre parcours moyen d'une particule dans l'écoulement infini non perturbé.

Remarque :

Dans le modèle VHS, le libre parcours moyen infini est lié à la viscosité par la loi

$$MFP_\infty = (7 - 2\omega)(5 - 2\omega) \frac{2\mu_\infty}{15\rho_\infty \sqrt{2\pi RT_\infty}},$$

et la définition du Reynolds est

$$(Re/m) = \frac{2(7 - 2\omega)(5 - 2\omega)}{15\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{\gamma}}{MFP_\infty} M_\infty.$$

4.3 Echange d'énergie T-R dans une collision inélastique: le modèle Borgnakke-Larsen

Si une collision est choisie, on calcule les vitesses et énergies internes après collision par un modèle qui conserve la quantité de mouvement et l'énergie totale.

Les échanges d'énergie de translation et d'énergie de rotation au cours des collisions sont traités par le modèle de phénoménologique de Borgnakke-Larsen. Ce modèle conserve la quantité de mouvement et l'énergie totale d'un système de deux particules qui entrent en collision.

La conservation de la quantité de mouvement, pour un couple de particules de vitesses (ξ, ξ_*) et (ξ', ξ'_*) respectivement avant et après choc, s'écrit

$$\frac{\xi + \xi_*}{2} = \frac{\xi' + \xi'_*}{2},$$

et la conservation de l'énergie totale

$$\frac{1}{2} (\xi^2 + \xi_*^2) + e_m + e_{m*} = \frac{1}{2} (\xi'^2 + \xi'^2_{*}) + e'_m + e'_{m*},$$

que l'on peut encore écrire

$$\left(\frac{\xi + \xi_*}{2}\right)^2 + \left(\frac{\xi - \xi_*}{2}\right)^2 + e_m + e_{m*} = \left(\frac{\xi' + \xi'_*}{2}\right)^2 + \left(\frac{\xi' - \xi'_*}{2}\right)^2 + e'_m + e'_{m*}.$$

On relaxe l'énergie complémentaire de celle du centre de masse, de la manière suivante

$$\left(\frac{\xi' - \xi'_*}{2}\right)^2 = \mathcal{R} \left[\left(\frac{\xi - \xi_*}{2}\right)^2 + e_m + e_{m*} \right],$$

$$e'_m + e'_{m*} = (1 - \mathcal{R}) \left[\left(\frac{\xi - \xi_*}{2}\right)^2 + e_m + e_{m*} \right],$$

où \mathcal{R} est un nombre aléatoire. Ensuite l'énergie interne est répartie entre les deux molécules de la manière suivante

$$e'_m = r(1 - \mathcal{R}) \left[\left(\frac{\xi - \xi_*}{2}\right)^2 + e_m + e_{m*} \right],$$

$$e'_{m*} = (1 - r)(1 - \mathcal{R}) \left[\left(\frac{\xi - \xi_*}{2}\right)^2 + e_m + e_{m*} \right].$$

où r est un nombre aléatoire.

Le tirage du nombre aléatoire R est réalisé à partir des distributions à l'équilibre des énergies de translation et des énergies internes, selon la méthode introduite par Bird [3], que nous décrivons maintenant.

L'énergie de translation de la paire de molécules qui entrent en collision s'écrit

$$(14) \quad E_t = \frac{1}{4} |v_r|^2,$$

Dans le cas du modèle *VHS*, la distribution de E_t est donnée par

$$(15) \quad f_{E_t} \sim E_t^{3/2-\omega} \exp\left(-\frac{E_t}{kT}\right).$$

où k est la constante de Boltzmann et ω la puissance de la température dans la loi de viscosité. Pour l'énergie interne e_{mi} d'une particule i , dont le nombre de degré de liberté est ζ , la fonction de distribution est donnée par [13]

$$(16) \quad f_{e_{mi}} \sim e_{mi}^{\zeta/2-1} \exp\left(-\frac{e_{mi}}{kT}\right).$$

Dans les définitions précédentes, la température est celle du fluide à l'équilibre. En pratique elle est déterminée localement à partir de l'énergie totale E_c de la collision. Enfin l'énergie interne E_i de la paire est la somme des énergies internes de chaque molécule $E_i = e_{mi} + e_{mi,*}$.

Nous pouvons facilement déduire de (16) la fonction de distribution de l'énergie interne de la paire de molécules. D'abord, la fraction de paires de molécules telle qu'une molécule a l'énergie interne e_{mi} et l'autre l'énergie interne $e_{mi,*}$ est donnée par

$$(17) \quad f_{e_{mi}} f_{e_{mi,*}} de_{mi} de_{mi,*} \sim e_{mi}^{\zeta/2-1} e_{mi,*}^{\zeta/2-1} \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right) de_{mi} de_{mi,*}.$$

Alors, pour une valeur particulière de e_{mi} , la seconde particule à l'énergie interne $e_{mi,*} = E_i - e_{mi}$. La fraction de particules correspondante est donnée par

$$(18) \quad e_{mi}^{\zeta/2-1} (E_i - e_{mi})^{\zeta/2-1} \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right) dE_i de_{mi}.$$

Enfin, intégrant par rapport à e_{mi} de 0 à E_i , nous obtenons

$$(19) \quad f_{E_i} \sim E_i^{\zeta/2-1} \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right).$$

Nous pouvons alors en déduire la probabilité P d'obtenir une valeur particulière de l'énergie de translation E_t . Tout d'abord, la densité de probabilité de E_t et E_i est donnée par le produit de f_{E_t} et f_{E_i} . Sachant que $E_c = E_t + E_i$, elle s'écrit

$$(20) \quad E_t^{3/2-\omega} (E_c - E_t)^{\zeta-1} \exp\left(-\frac{E_c}{kT}\right).$$

Enfin, puisque que E_c est constante dans une collision et que la température est localement constante, la probabilité P cherchée s'écrit

$$(21) \quad P = C E_t^{3/2-\omega} (E_c - E_t)^{\zeta-1},$$

où C est une constante.

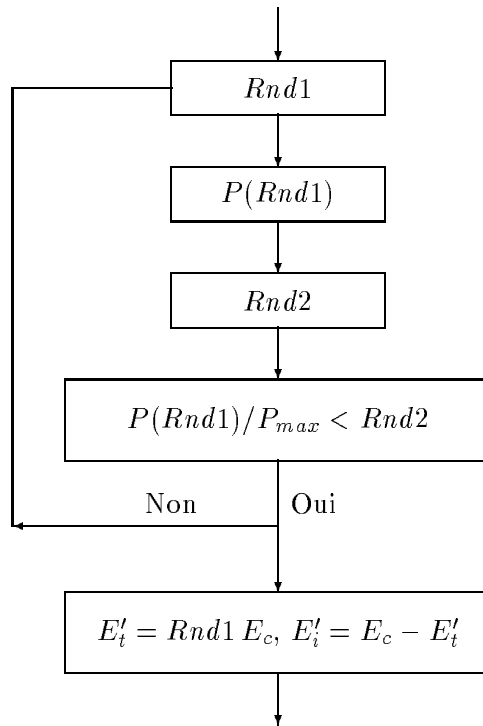
D'un point de vue numérique, la valeur de l'énergie de translation E'_t , après collision, est choisie dans l'intervalle $[0, 1]$, par une méthode d'acceptation-rejet. Pour ce faire nous avons besoin de la valeur maximale P_{max} de la probabilité P . Elle est atteinte pour

$$(22) \quad E_t = \frac{3/2 - \omega}{\zeta + 1/2 - \omega} E_c,$$

et vaut

$$(23) \quad P_{max} = C \left(\frac{3}{2} - \omega \right)^{3/2-\omega} (\zeta - 1)^{\zeta-1} \left[\left(\zeta + \frac{1}{2} - \omega \right) E_c \right]^{\zeta+1/2-\omega}.$$

Alors, pour une paire de particules donnée, connaissant E_c et E_t avant collision, l'énergie E'_t est déterminée par l'algorithme suivant



où $Rnd1$ et $Rnd2$ sont des nombres aléatoires tirés selon une loi uniforme dans $[0, 1]$. Dans la cas qui nous intéresse, puisque les deux molécules sont identiques, l'énergie interne totale E_i peut être répartie uniformément entre les deux molécules. Le nombre r est donc tiré selon une loi uniforme dans $[0, 1]$.

Le modèle est complètement décrit si l'on précise la vitesse de chaque molécule après collision. D'après les formules (4) les vitesses des molécules après collision s'écrivent

$$(24) \quad \xi' = \frac{\xi + \xi_*}{2} + |v'_r| w, \xi'_* = \frac{\xi + \xi_*}{2} - |v'_r| w,$$

où w est un vecteur de la sphère unité. Il est tiré selon une loi uniforme car aucune direction n'est privilégiée. Le module de la vitesse relative est déduit de la relation

$$(25) \quad E'_t = \frac{1}{2} m_r |v'_r|^2.$$

Dans notre modèle les collisions ne sont pas nécessairement toutes inélastiques. Nous introduisons la quantité $1/Z_R$, qui représente la probabilité, pour une paire de particule

sélectionnée, qu'il y ait effectivement un échange d'énergie de translation et de rotation. Le nombre Z_R , appelé nombre de relaxation rotationnelle, détermine la fréquence des collisions T-R. Nous nous contentons actuellement d'une valeur constante (généralement 5), bien que des expressions plus réalistes lient Z_R à la température du gaz, voir des exemples dans [16], ou pour plus de détails [18], [22].

4.4 Les conditions aux limites

4.4.1 Conditions sur le corps

Les interactions entre le gaz et le corps sont exprimées par une condition aux limites agissant sur la distribution $f(x, \xi, I)$. Ces interactions sont très complexes et difficiles à modéliser. Nous utilisons le modèle d'accommodation de Maxwell donné par

$$f(x, \xi, I) = \beta(x) f(x, R\xi, I) + (1 - \beta(x)) f_o(\xi, I)$$

$$\forall \xi \text{ tel que } \xi \cdot n > 0,$$

$$\forall x \in \Omega, \int \xi \cdot n(x) f(x, \xi, I) d\xi dI.$$

Le vecteur n désigne la normale extérieure à l'obstacle en $x \in \partial\Omega$, $\beta(x) \in (0, 1)$ est le coefficient d'accommodation de Maxwell et

$$R\xi = \xi - 2(\xi \cdot n(x))n(x),$$

est la vitesse de la particule après une réflexion élastique sur la paroi. La distribution f_o est la Maxwellienne de paramètres la vitesse et la température du corps.

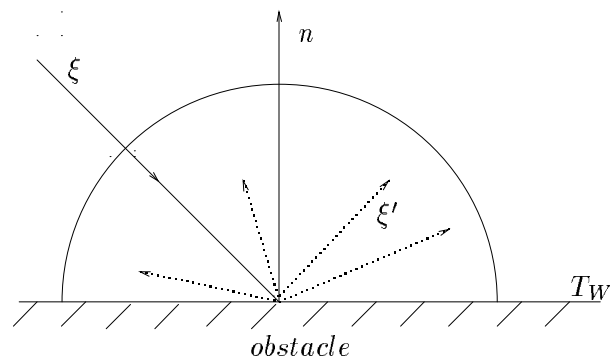
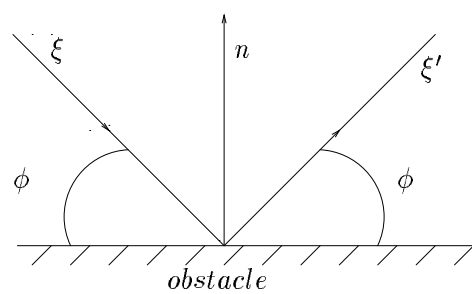
Cette condition de bord est imposée numériquement à toutes les particules qui rencontrent l'obstacle pendant la phase de transport libre. Elles sont réfléchies après impact avec la vitesse v^+ et l'énergie interne I^+ données par accommodation totale ($v^+ = v_a^+$, $I^+ = I_a^+$) si $a < \beta$, et par réflexion spéculaire sinon. Le coefficient a est un nombre aléatoire choisi dans l'intervalle $(0, 1)$, et (v_a^+, I_a^+) est calculé par un tirage aléatoire selon la loi de probabilité de distribution $\lambda f_o(\xi, t)$. Nous pouvons également considérer une accommodation totale (figure 3) ou une réflexion spéculaire pure (figure 4).

4.4.2 Conditions à l'infini

D'un point de vue mathématique, on veut simuler la condition aux limites

$$f_{CL} = \text{Maxwell}(\rho, u, T)(\xi) = \frac{\rho}{(2\pi R_g T)^{(3/2)}} \exp\left(-\frac{|\xi - u|^2}{2R_g T}\right),$$

pour les particules entrantes (ie $\xi \cdot n \leq 0$). Pour ce faire, on génère une couche de cellules frontières. Pour chacune de ces cellules C_i on se donne $(\rho, u, T)_{(C_i, \infty)}$ et on génère un nombre de particules qui est l'entier le plus proche de $(\rho/\rho_i \text{ nfty}) N_\infty$. La position de chaque particule est donnée par une loi de distribution uniforme, la vitesse et l'énergie

FIG. 3 - *réflexion avec accommodation*FIG. 4 - *réflexion spéculaire*

interne sont données par la maxwellienne généralisée de paramètres $(\rho, u, T)_{(C_i, \infty)}$. Ainsi on choisit

$$\xi_x = u_x + (-T \ln(a_3))^{\frac{1}{2}} \cos(2\pi a_1),$$

$$\xi_y = u_y + (-T \ln(a_3))^{\frac{1}{2}} \sin(2\pi a_1),$$

$$\xi_z = u_z + (-T \ln(a_4))^{\frac{1}{2}} \cos(2\pi a_2),$$

$$e_m = \frac{N_{rot}}{4} (-T \ln(a_5)),$$

où $(a_1, a_2, a_3, a_4, a_5)$ sont cinq nombres tirés selon une loi uniforme entre 0 et 1.

5 Modélisation des phénomènes vibratoires

Pour des écoulements hypersoniques mettant en jeu des températures élevées, il est nécessaire d'introduire les énergies de vibration des molécules, pour prendre en compte les échanges entre modes de translation et de vibration. Contrairement aux énergies de translation et de rotation, le spectre des modes d'énergie de vibration ne peut être supposé continu car les niveaux d'énergie sont trop espacés. De plus, seuls certains niveaux d'énergie sont accessibles lorsque la molécule vibre; ce sont les niveaux admissibles. Ils sont déterminés en théorie de la mécanique quantique en résolvant l'équation de Schrodinger, voir par exemple [10], [14]. Les modèles classiquement utilisés, pour décrire les phénomènes vibratoires, sont les modèles d'oscillateurs harmoniques et non harmoniques. Dans ce cas une molécule est modélisée par deux atomes reliés par un ressort, et pouvant osciller autour du centre de masse.

5.1 Le modèle de l'oscillateur harmonique

L'énergie potentielle associée à ce modèle est donnée par

$$(26) \quad V = \frac{1}{2}(x - x_0)^2 e,$$

où e est la constante d'élasticité moléculaire et x_0 la position d'équilibre. La relation (26) montre que le potentiel est proportionnel à l'écart quadratique par rapport à la position d'équilibre. A partir de ce potentiel, la résolution de l'équation de Schrodinger conduit à introduire des états d'énergie quantique admissibles donnés par

$$(27) \quad \varepsilon_i = \left(i + \frac{1}{2}\right) h\nu,$$

où $i = 1, 2, \dots$ est le nombre quantique, $\nu = \sqrt{e/2\pi^2 m}$ la fréquence de vibration de l'oscillateur et h la constante de Planck. La quantité $h\nu$, qui est une énergie, est souvent appelée énergie caractéristique. Elle est indépendante du nombre quantique i . Notons encore que par convention, les niveaux d'énergie sont comptés à partir du niveau 0, ce qui revient à soustraire pour chaque niveau d'énergie la quantité $h\nu/2$. Ainsi l'expression (27) devient

$$(28) \quad \varepsilon_i = i h\nu.$$

Nous remarquons, pour ce modèle, que le saut d'énergie entre deux niveaux consécutifs est constant. En effet,

$$(29) \quad \varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i = h\nu.$$

Mais ce modèle n'est pas très réaliste. En particulier il ne prend pas en compte la dissociation de la molécule, les atomes continuant à vibrer même pour des distances infinies. On est ainsi conduit à introduire le modèle suivant.

5.2 Le modèle de l'oscillateur non harmonique

Pour ce modèle les écarts entre les niveaux d'énergie décroissent avec l'accroissement de l'énergie de vibration. De plus, une molécule ne peut posséder une énergie de vibration plus grande qu'une énergie seuille de dissociation, à partir de laquelle la molécule se dissocie en deux atomes. La résolution de l'équation de Schrodinger est réalisée pour le potentiel de Morse qui s'écrit

$$V = a(1 - \exp(-b(x - x_0)))^2$$

où a et b sont des constantes empiriques liées à l'énergie de dissociation E_d . Les énergies de vibration admissibles sont données par l'expression suivante

$$(30) \quad \varepsilon_i = \left(i + \frac{1}{2}\right) h\nu - \frac{h^2\nu^2}{4E_d} \left(i + \frac{1}{2}\right)^2,$$

que l'on peut écrire, introduisant la température caractéristique θ_v

$$(31) \quad \varepsilon_i = \left(i + \frac{1}{2}\right) k\theta_v \left[1 - \chi \frac{k\theta_v}{4E_d} \left(i + \frac{1}{2}\right)\right]$$

où k est la constante de Boltzmann et χ un paramètre qui vaut 0 pour l'oscillateur non-harmonique et 1 pour l'oscillateur harmonique.

5.3 Distribution de Boltzmann- Energie moyenne de vibration

A l'équilibre la population du niveau d'énergie j est donnée par la distribution de Boltzmann

$$(32) \quad N_j^* = N g_j \frac{e^{-\varepsilon_j/kT}}{\sum_l g_l e^{-\varepsilon_l/kT}},$$

où N est le nombre total de particules constituant le gaz, et g_j le nombre d'états qui ont une énergie ε_j . Dans le cas où g_j est différent de 1, on dit que le niveau j est dégénéré. On introduit la fonction de répartition Q définie par

$$(33) \quad Q = \sum_l g_l e^{-\varepsilon_l/kT}.$$

L'expression (32) établie par la théorie de la mécanique statistique est liée à la thermodynamique par la relation de Boltzmann. On en déduit en particulier l'expression de l'énergie moyenne pour un vibration, qui s'écrit

$$(34) \quad \langle \varepsilon_v \rangle = kT^2 \frac{\partial \log(Q)}{\partial T}.$$

Le nombre de degré de liberté ζ_v , d'une molécule, pour le mode de vibration, se déduit du principe d'équipartition de l'énergie à l'équilibre. Ainsi, nous pouvons écrire

$$(35) \quad \zeta_v = \frac{2 \langle \varepsilon_v \rangle}{kT}.$$

Dans le cas de l'oscillateur (harmonique ou non harmonique), aucun niveau n'est dégénéré. La fonction de partition, pour le cas de l'oscillateur harmonique, peut s'écrire

$$(36) \quad Q = \frac{1}{1 - e^{-\theta_v/T}}.$$

On déduit alors facilement de (34) l'énergie de vibration moyenne

$$(37) \quad \langle \varepsilon_v \rangle = \frac{k \theta_v}{e^{-\theta_v/T} - 1},$$

et de (35), le nombre de degré de liberté pour le mode de vibration

$$(38) \quad \zeta_v = \frac{2\theta_v/T}{e^{\theta_v/T} - 1}.$$

Dans le cas de l'oscillateur non harmonique, nous obtenons pour le nombre de degré de liberté

$$(39) \quad \zeta_v = 2 \frac{\sum_{j=0}^{j_{max}} (\varepsilon_j/kT) e^{-\varepsilon_j/kT}}{\sum_{j=0}^{j_{max}} e^{-\varepsilon_j/kT}},$$

où j_{max} est donné par

$$(40) \quad j_{max} = \left\lceil \frac{2E_d}{\chi k \theta_v} (1 - \sqrt{1 - \chi}) \right\rceil.$$

Nous avons donc présenté deux modélisations d'une molécule avec énergie interne de vibration et exprimé certaines grandeurs microscopiques et macroscopiques associées. Dans le paragraphe suivant nous présentons les probabilités de transition entre les différents niveaux d'énergie.

6 Probabilité d'échange d'énergie VT et probabilité de transition

Lors d'une collision le changement de niveau d'énergie, qui peut être multiple, n'affecte qu'une seule des deux molécules. Dans la suite, nous rappelons les sections efficaces pour ce nouveau modèle, desquelles découlent les probabilités d'échange d'énergie T-V.

Les collisions sont classées en trois groupes selon le paramètre adiabatique λ_k , donné par

$$(41) \quad \lambda_k = \omega(n_k) \frac{d}{v_k},$$

où $k = i, f$, selon que la valeur est considérée respectivement avant ou après la collision, et

$$(42) \quad \omega(n_k) = \nu \left[1 - \chi \frac{k \theta_v}{4E_d} \left(n_k + \frac{1}{2} \right) \right],$$

et

$$(43) \quad v_k = \sqrt{\frac{2E_k}{\mu}},$$

où n_k est le nombre quantique de vibration, v_k et E_k sont la vitesse et l'énergie liées au mouvement de translation et μ la masse réduite de la paire de particules. De plus, d est un paramètre du potentiel Morse.

$$(44) \quad V(r) = D \left[\exp\left(-\frac{(r-r_0)}{d}\right) - 2\exp\left(-\frac{(r-r_0)}{d}\right) \right].$$

En fonction du paramètre λ_k les collisions sont classées en trois groupes

- collisions lentes

$$(45) \quad \begin{aligned} 1 &< \lambda_2 < \lambda_i, \\ 1 &< \lambda_2 < \lambda_f; \end{aligned}$$

- collisions rapides

$$(46) \quad \begin{aligned} \lambda_i &< \lambda_1 < 1, \\ \lambda_f &< \lambda_1 < 1; \end{aligned}$$

- collisions modérées
toutes les autres collisions.

Ci-dessus λ_1 et λ_2 sont des constantes.

Nous rappelons maintenant les sections efficaces pour les transitions d'un niveau de vibration n_i à un niveau n_f pour chaque type de collisions. Elle sont calculées pour le potentiel d'interaction moléculaire de Morse. Le détail des calculs est donné dans [4].

Collisions lentes

$$(47) \quad \begin{aligned} \sigma_{n_i, n_f} &= \sigma_T \frac{v_f}{v_i} A_{VT} \exp \left[-2\Delta_n \lambda_m \arctan \left(\sqrt{\frac{E_m}{D}} \right) \right] / \\ &\quad \left[\Delta_n \lambda_m \left(\arctan \left(\sqrt{\frac{E_m}{D}} \right) - \sqrt{\frac{E_m}{D}} / \left(\frac{E_m}{D} + 1 \right) \right) \right], \end{aligned}$$

où

$$(48) \quad A_{VT} = \frac{\varepsilon_m^{\Delta_n}}{(\Delta_n!)^2} \left[\frac{\pi d}{4h} \left[a_1 \mu d \omega(n_k) - (2a_2 - a_1) \sqrt{2\mu D} \right] \right]^{2\Delta_n},$$

$$(49) \quad \Delta_n = |n_f - n_i|, \quad m = \min(i, f),$$

$$(50) \quad \varepsilon_m = \left(m + \frac{1}{2} \right) \left(1 - \chi \frac{k\theta_v}{2E_d} \left(m + \frac{1}{2} \right) \right),$$

et a_1, a_2 sont les paramètres d'anisotropie du potentiel.

La section efficace totale de collision est calculée à partir du potentiel de Lennard-Jones

$$(51) \quad V(r) = 4\kappa \left(\left(\frac{\sigma_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_0}{r} \right)^6 \right),$$

où κ et σ_0 sont des paramètres. Elle est donnée par

$$(52) \quad \sigma_T = \pi \sigma_0 \left[2 \left(\frac{5\pi \kappa \sigma_0}{4h v_m} \right)^{2/5} + 1 + \frac{1}{6} \left[1 + \ln \left(\sqrt{5\pi} \frac{4\kappa}{E_m + 4\pi \kappa} \right) \right] \right].$$

Pour calculer σ_0 on peut choisir n'importe quel potentiel de collision à condition qu'il soit correctement corrélé au potentiel de Morse. Dans le cas présent nous avons

$$(53) \quad \begin{aligned} \kappa &= D, \\ \sigma_0 &= \left(\frac{r_0}{2} \right)^{1/6}. \end{aligned}$$

Collisions rapides

L'expression de la section efficace de collision pour les transition VT est donnée par

$$(54) \quad \begin{aligned} \sigma_{n_i, n_f} &= 2\pi d^2 \frac{v_f}{v_i} \int_{x_0}^{\infty} x \left[1 - \frac{D}{E_i} e^{-(x-x_{00})} \left(e^{-(x-x_{00})} (1-x) - 2+x \right) \right] \\ &\quad (J_{\Delta_n}(|F(k, x)|))^2 dx, \end{aligned}$$

où $J_m(x)$ sont les fonctions de Bessel, $x_0 = x_{00} - \ln \left(1 + \sqrt{1 + E_i/D} \right)$, $x_{00} = r_0/d$,

$$(55) \quad F(k, x) = \frac{DSd}{2h} \sqrt{\pi x \varepsilon_k} e^{-(x-x_{00})} \left(a_1 e^{-(x-x_{00})} - 2\sqrt{2}a_2 \right),$$

$$(56) \quad S = \begin{cases} \frac{1}{v_m} & \lambda_m < \lambda_1, \lambda'_m > \lambda_1, m' \neq m; \\ \sqrt{\frac{1}{v_i^2} + \frac{1}{v_f^2}} & \lambda_i < \lambda_1, \lambda_f < \lambda_1. \end{cases}$$

L'intégrande de l'expression (54) doit être positive ce qui implique que l'énergie E_m doit être suffisamment grande. Mais cette condition n'est violée que pour des températures très basses ($T < 50K$) auquel cas les collisions sont lentes.

Collisions modérées

Dans ce cas la section efficace de collision est obtenue par interpolation des sections efficaces des collisions lentes et rapides de la manière suivante

$$(57) \quad \sigma_{n_i, n_f} = \exp \left(\frac{\lambda_2 - \lambda_m}{\lambda_2 - \lambda_1} \ln(\sigma_{n_i, n_f}(\lambda_1)) + \frac{\lambda_m - \lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} \ln(\sigma_{n_i, n_f}(\lambda_2)) \right),$$

où $\sigma_{n_i, n_f}(\lambda_1)$ est donnée par (54) avec $\lambda_m = \lambda_1$ et $\sigma_{n_i, n_f}(\lambda_2)$ par (47) avec $\lambda_m = \lambda_2$.

6.1 Implémentation

Les formules précédentes montrent trivialement qu'il serait trop honoreux de calculer les sections efficaces de collision pour chaque collision. Par conséquent, des matrices contenant les probabilités de transition VT, sont calculées préalablement et utilisées comme données pour toute simulation. Un élément de la matrice de probabilité s'écrit

$$(58) \quad P(s, n_i, \Delta, i_g) = \frac{\sigma_{n_i, n_f}(v_i)}{\varepsilon \sigma_T(v_i)},$$

où $\varepsilon = 1/2$ si les molécules qui entrent en collision sont différents et $\varepsilon = 1$ sinon. Les notations utilisées sont les suivantes:

- $s = 1, 2, \dots, N_s$. Les interactions considérées sont toujours du type $A(n_i) + B \rightarrow A(n_f) + B$. s caractérise les espèces A et B ; N_s vaut 1 pour un gaz d'une espèce diatomique, 2 pour un mélange de deux espèces dont l'une est une molécule, etc.
- $n_i = 0, 1, \dots, n_{max}$ est le niveau de vibration avant collision. La valeur de n_{max} dépend de la molécule considérée. Pour l'azote, la valeur de n_{max} est 46.
- $i_g = 1, 2, \dots, N_g$ est l'indice de la matrice de probabilité correspondant à une vitesse relative v_i de la pair de particules qui entre en collision. On choisit préalablement une valeur maximale v_{max} de la vitesse relative ainsi qu'un nombre de subdivision N_g de l'intervalle $[0..v_{max}]$. Alors l'indice i_g , pour la vitesse v_i , est donné par la formule

$$(59) \quad i_g = \frac{N_g}{v_{max}} v_i + \frac{1}{2}.$$

- $\Delta = 1, 2, \dots, N_\Delta$ est un entier permettant de déterminer le niveau de vibration n_f après collision. Plus précisément

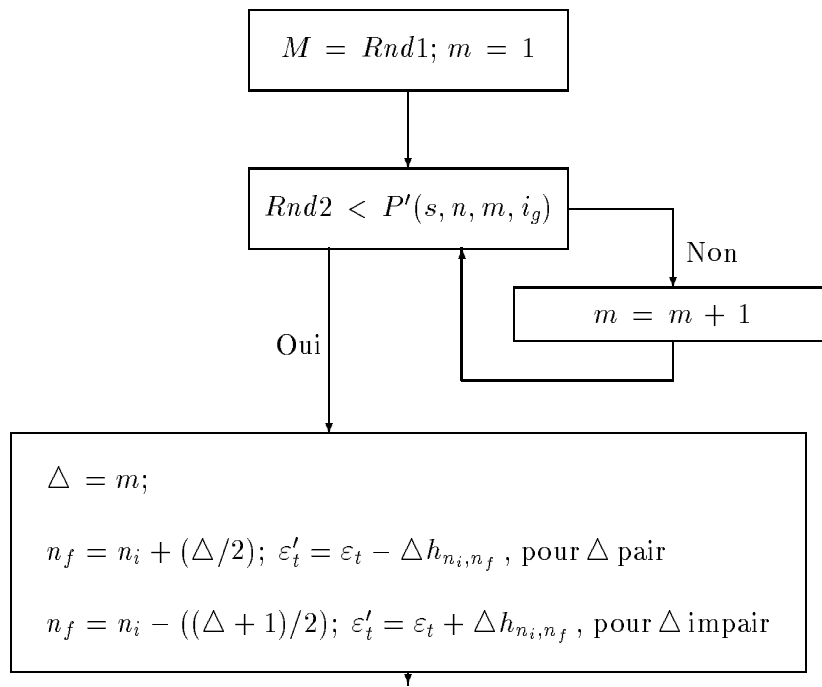
$$(60) \quad \begin{cases} n_f = n_i + \frac{\Delta}{2} & \text{pour } \Delta \text{ pair,} \\ n_f = n_i - \frac{\Delta + 1}{2} & \text{pour } \Delta \text{ impair.} \end{cases}$$

Pour (s, n_i, i_g) fixé, en sommant $P(s, n_i, \Delta, i_g)$ sur les indices Δ , nous obtenons une nouvelle matrice $P_M(s, n_i, i_g)$, qui exprime la probabilité de transition d'un niveau d'énergie n_i à un autre quelconque niveau d'énergie admissible. Un élément de cette matrice s'écrit

$$(61) \quad P_M(s, n_i, i_g) = \sum_{\Delta=1}^{N_\Delta} P(s, n_i, \Delta, i_g).$$

Enfin, une nouvelle matrice P' est définie de la manière suivante

$$(62) \quad P'(s, n_i, \Delta, i_g) = \sum_{j=1}^{\Delta} \frac{P(s, n_i, j, i_g)}{P_M(s, n_i, i_g)}.$$

FIG. 5 - *Algorithme d'échange d'énergie dans une collision VT.*

Sous cette forme la probabilité de transition croit de 0 à 1 quand Δ augmente.

Une paire de particules étant sélectionnée pour relaxer l'énergie de vibration, l'échange d'énergie suit l'algorithme décrit figure (5).

L'algorithme global des collisions est présenté figure (30).

6.2 Conditions initiales et aux limites- calcul de la température

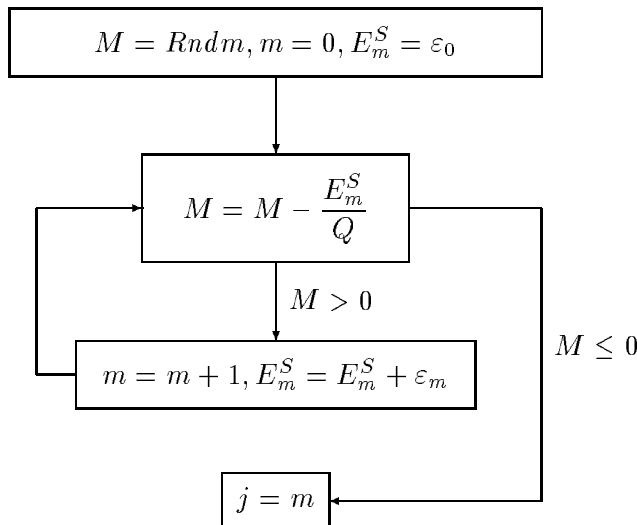
Tirage aléatoire des niveaux d'énergie vibrationnels

Pour le mode d'énergie interne de vibration les simulations de la distribution initiale, de la distribution à l'infinie (dans la couche de cellules frontières), ainsi que de la réflexion sur le corps sont réalisées selon la même méthode. La seule différence est la température de vibration T_v considérée dans chaque cas.

Ainsi, si la température de vibration $T_v = 0$, toutes les particules sont dans le même niveau 0. Si $T_v \neq 0$, alors les niveaux d'énergie des particules sont tirés selon la distribution de Boltzmann à l'équilibre

$$(63) \quad \frac{N_j^*}{N} = \frac{e^{-\varepsilon_j/kT_v}}{Q}.$$

Comme nous ne considérons que des oscillateurs harmoniques et non harmoniques, aucun niveau d'énergie n'est dégénéré. L'algorithme qui permet de choisir, pour une molécule, de manière aléatoire son niveau d'énergie quantique j parmi tous les niveaux possibles jusqu'à j_{max} , pour une molécule donnée, est le suivant



Calcul des températures de vibration et moyenne

La température de vibration est déterminée dans chaque cellule C_i du maillage à partir de l'énergie moyenne de vibration $\langle \varepsilon_v \rangle_{C_i}$. Pour cela nous inversons l'équation

$$\langle \varepsilon_v \rangle_{C_i} = \frac{\sum_{j=0}^{j_{max}} \varepsilon_j e^{-\varepsilon_j/kT_v}}{\sum_{j=0}^{j_{max}} e^{-\varepsilon_j/kT_v}}.$$

On en déduit le nombre de degré de liberté ζ_v pour le mode de vibration, pour la cellule, à partir du principe d'équipartition de l'énergie

$$\zeta_v = 2 \frac{\langle \varepsilon_v \rangle}{kT_v}.$$

Finalement la température moyenne T_m est donnée par la formule

$$T_m = \frac{3T_{tr} + \zeta_r T_r + \zeta_v T_v}{3 + \zeta_r + \zeta_v}$$

Ceci achève les différentes modifications que nous avons apportés a notre code pour prendre en compte l'énergie interne de vibration.

6.3 Résultats numériques

Les résultats numériques que nous obtenons sont comparés aux résultats obtenus par le code développé par l'équipe du professeur Ivanov. Leur code utilise les mêmes modèles d'échange d'énergie et de potentiel d'interaction moléculaire. Ce code est basé sur la méthode " Time Counter " améliorée par la technique " Majorant Collision Frequency ".

Écoulement uniforme

Pour ce cas test le gaz est contenu dans une boîte rectangulaire. Nous supposons qu'il n'y a aucun échange avec le milieu extérieur. La condition aux limites sur cette paroi est une réflexion spéculaire pour les vitesses, les énergies internes restant inchangées après une collision. Dans le but de mesurer les temps de relaxation des différents modes d'énergies (translation, rotation et vibration), nous déséquilibrons le mode de vibration. L'énergie interne de vibration est imposée égale à zéro.

Pour donner un sens à la comparaison des résultats nous avons adapté les pas de temps de transport libre de telle sorte qu'après chaque itération nous réalisons le même nombre de collisions. En effet les échanges d'énergie s'effectuent seulement par les collisions. Le retour à l'équilibre dépend donc seulement du nombre de collision réalisées. Rappelons que l'équilibre est atteint lorsque les températures de translation, de rotation et de vibration sont égales. Ceci résulte de l'équipartition de l'énergie à l'équilibre.

Le premier résultat est obtenu pour un gaz constitué de molécules d'oxygène O_2 . Les paramètres de l'écoulement sont les suivants

$$\begin{aligned} MFP &= 0.1m, \\ R &= 259, \\ \omega &= 0.75, \\ Z_{rot} &= 5. \end{aligned}$$

Le nombre de cellules du maillage est de 8. Le code ne permet pas d'utiliser le maillage particulier constitué d'une seule cellule. Chaque cellule contient 8000 particules. Les valeurs numériques sont présentées dans le tableau suivant. Nous donnons les températures adimensionnées pour 4 nombres d'itération successifs. Les comparaisons avec les résultats du Pr. Ivanov sont tout-à-fait satisfaisants. Nous pouvons considérer que l'équilibre est atteint après 1000 itérations.

nb. pas de tps	10	33	100	333	1000
T_{tr} (Inria)	0.975	0.940	0.869	0.781	0.742
T_{rot} (Inria)	0.991	0.954	0.887	0.778	0.745
T_{vib} (Inria)	0.078	0.165	0.321	0.590	0.746
T_{tr} (Ivanov)	0.976	0.941	0.876	0.779	0.745
T_{rot} (Ivanov)	0.990	0.953	0.878	0.779	0.743
T_{vib} (Ivanov)	0.081	0.168	0.324	0.597	0.746

FIG. 6 - *Ecoulement uniforme pour l'oxygène*

Le cas test suivant concerne un gaz constitué de molécules d'azote N_2 . Les paramètres de l'écoulement sont les suivants

$$\begin{aligned}
 MFP &= 0.1m, \\
 R &= 296, \\
 \omega &= 0.75, \\
 Z_{rot} &= 5.
 \end{aligned}$$

Pour ce gaz le temps de relaxation est beaucoup plus long. L'équilibre est atteint après 3000 pas de temps. Les figures (9) et (10) représentent les distributions des vitesses dans chaque direction. Elles sont comparées aux distributions exactes maxwelliennes caractérisant l'équilibre. Nous notons une bonne superpositions des courbes expérimentales et exactes. En particulier nous vérifions que l'équilibre est bien atteint. Les figures (11) et (12) représentent respectivement les distributions d'énergie de rotation et de vibration expérimentales. Elles sont comparées aux distributions exactes données par les formules (16) pour l'énergie de rotation, avec $\zeta = 2$, et (32) pour l'énergie de vibration. Pour ces deux distributions nous avons encore une très bonne superposition des courbes issues de la simulation et de la théorie. Remarquons enfin que tous les niveaux de vibration sont excités.

nb. pas de tps	10	33	100	333	1000	3000
T_{tr} (Inria)	0.982	0.958	0.910	0.823	0.742	0.714
T_{rot} (Inria)	0.997	0.971	0.918	0.826	0.745	0.713
T_{vib} (Inria)	0.074	0.140	0.262	0.463	0.645	0.714

FIG. 7 - *Ecoulement uniforme pour l'azote*

Ecoulement autour d'une plaque avec déflecteur

La prise en compte des échanges T-V est nécessaire pour modéliser les écoulements hypersoniques et d'autant plus que l'angle d'incidence est important. Différentes simulations numériques réalisées par le groupe du Pr. Ivanov ont mis en évidence l'importance des phénomènes de vibration en forte incidence. Ils ont comparé des simulations prenant en compte des échanges T-T, T-R ou T-R-V [15], pour une plaque munie d'un déflecteur (figure 8). Pour le cas test que nous réalisons ici, nous utilisons les mêmes données. Les

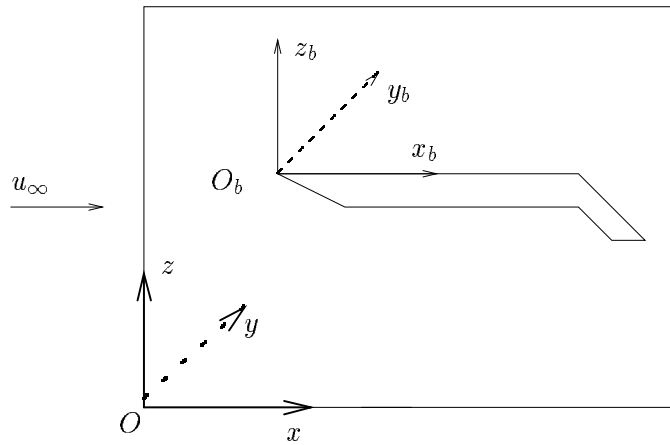


FIG. 8 - Schéma d'une plaque munie d'un déflecteur

paramètres de l'écoulement sont les suivants

$$\begin{aligned}
 MFP &= 0.01m, \\
 v_\infty &= 7600m/s, \\
 T_\infty &= 189K, \\
 T_{wall} &= 1000K, \\
 \text{réflexion} &= \text{accomodation totale}, \\
 \omega &= 0.75, \\
 Z_{rot} &= 5.
 \end{aligned}$$

Les données concernant la géométrie sont les suivantes

$$\begin{aligned}
 X_{domaine} &= 1.4m, \\
 Y_{domaine} &= 0.69m, \\
 \text{longueur de la plaque} &= 0.8m, \\
 \text{longueur du déflecteur} &= 0.2m, \\
 \text{angle du déflecteur} &= 30dg, \\
 \text{Nombre cellules} &= 140 \times 140, \\
 \text{Angle d'attaque} &= 40dg.
 \end{aligned}$$

Le premier écoulement concerne à nouveau un gaz constitué de molécules d'oxygène O_2 . La figure (13) représente les isovaleurs de la température moyenne. Les figures (14), (15) et (16) représentent respectivement les coefficients de friction C_f , de pression C_p et de chaleur C_h , dont les définitions sont

$$C_f = \frac{(\sigma \cdot n) \cdot \tau}{0.5 \rho_\infty u_\infty^2}, \quad C_{Fn} = \frac{(\sigma \cdot n) \cdot n}{0.5 \rho_\infty u_\infty^2}, \quad C_h = \frac{(q \cdot n)}{0.5 \rho_\infty u_\infty^3}.$$

Les figures (17), (18), (19) et (20) représentent des coupes transversales, à la distance $x = 1m$, respectivement des températures moyenne, de translation, de rotation et de

vibration. Les figures (21), (22), (23) et (24) représentent des coupes transversales des mêmes grandeurs mais pour $x = 0.5m$. Les comparaisons avec les solutions du Pr. Ivanov sont très satisfaisantes.

Enfin, nous avons considéré un écoulement d'azote N_2 dans les mêmes conditions. La figure (25) représente les isovaleurs de la température moyenne et les figures (26), (27) et (28) respectivement les coefficients C_f , C_p et C_h .

Remark 6.1 *Sur la convergence*

Pour les calculs d'écoulements externes avec échanges d'énergie T-R seuls, l'état stationnaire est atteint lorsque le nombre de particules dans le domaine de calcul est stable. Ce test n'est plus valable lorsque nous prenons en compte les échanges T-V. En effet, la fréquence des collisions T-V est beaucoup plus faible que la fréquence des collisions T-R. C'est l'expérience qui détermine approximativement le nombre d'itérations à effectuer.

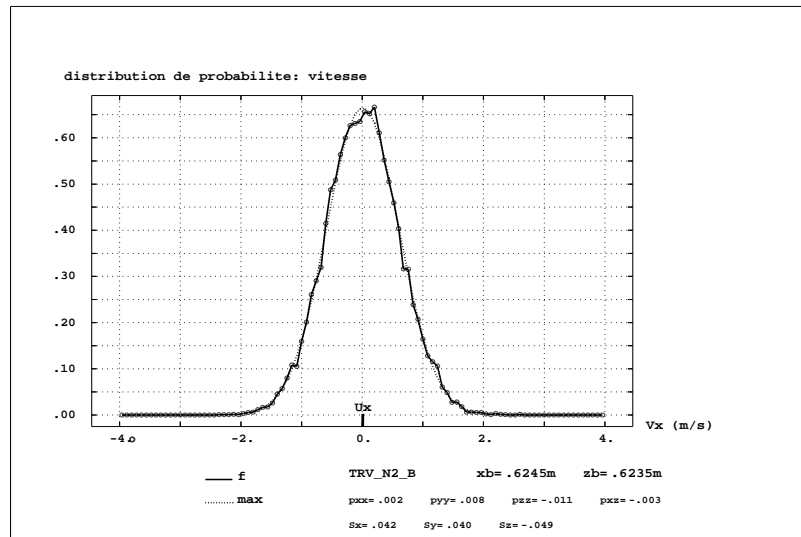


FIG. 9 - *Ecoulement homogène d'azote dans une boîte. Distribution des vitesses en x . Distribution obtenue par simulation en trait plein, distribution exacte en trait pointillé.*

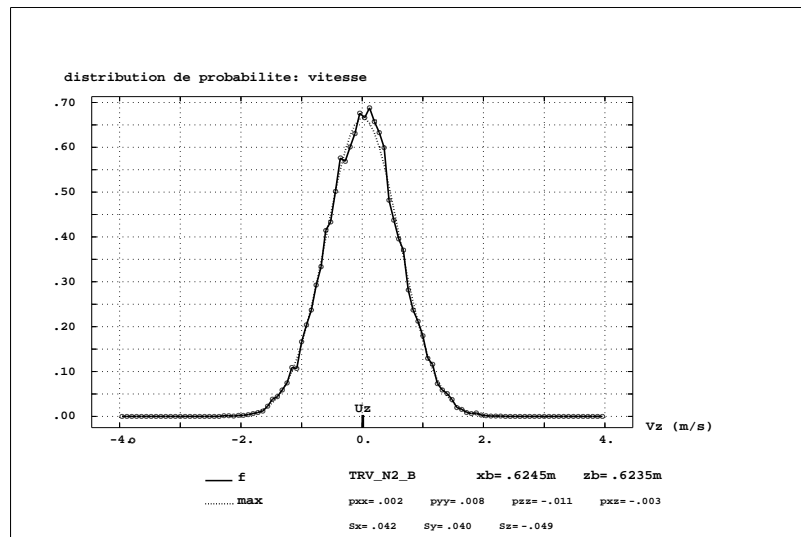


FIG. 10 - *Ecoulement homogène d'azote dans une boîte. Distribution des vitesses en z . Distribution obtenue par simulation en trait plein, distribution exacte en trait pointillé.*

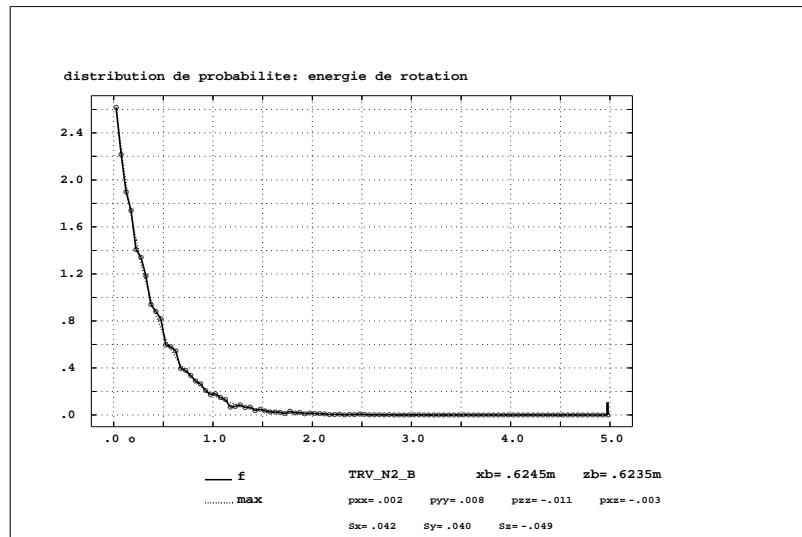


FIG. 11 - *Ecoulement homogène d'azote dans une boîte. Distribution des énergies de rotation. Distribution obtenue par simulation en trait plein, distribution exacte en trait pointillé.*

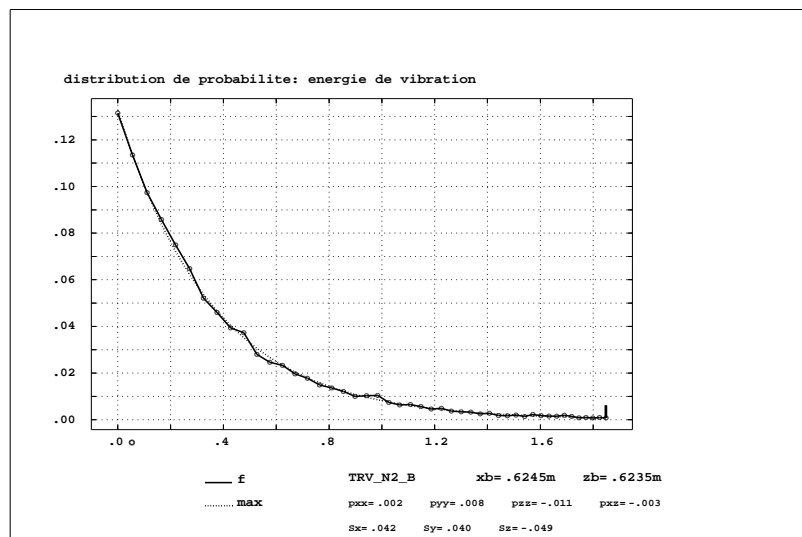


FIG. 12 - *Ecoulement homogène d'azote dans une boîte. Distribution des énergies de vibration. Distribution obtenue par simulation en trait plein, distribution exacte en trait pointillé.*

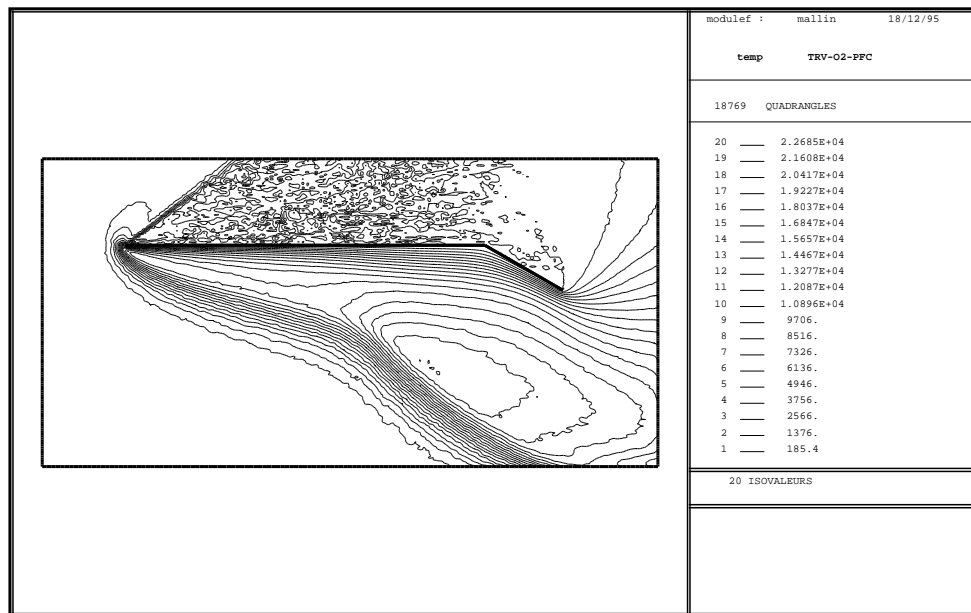


FIG. 13 - *Ecoulement d'oxygène autour d'une plaque avec déflecteur. Isolvaleurs de la température moyenne. Les oscillations au dessus de la plaque sont dues a un taux important de raréfaction du gaz.*

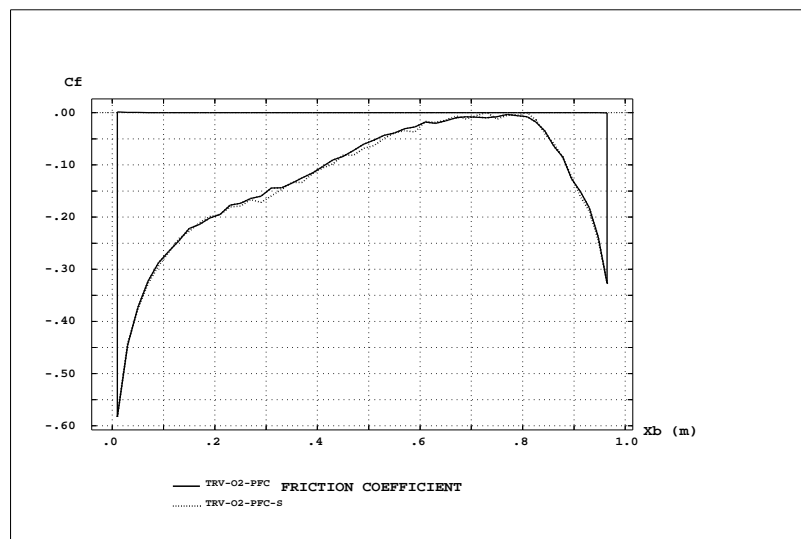


FIG. 14 - *Ecoulement d'oxygène autour d'une plaque avec déflecteur. Coefficient de friction obtenu par le code INRIA (trait plein) et par le code ITAM (trait pointillé).*

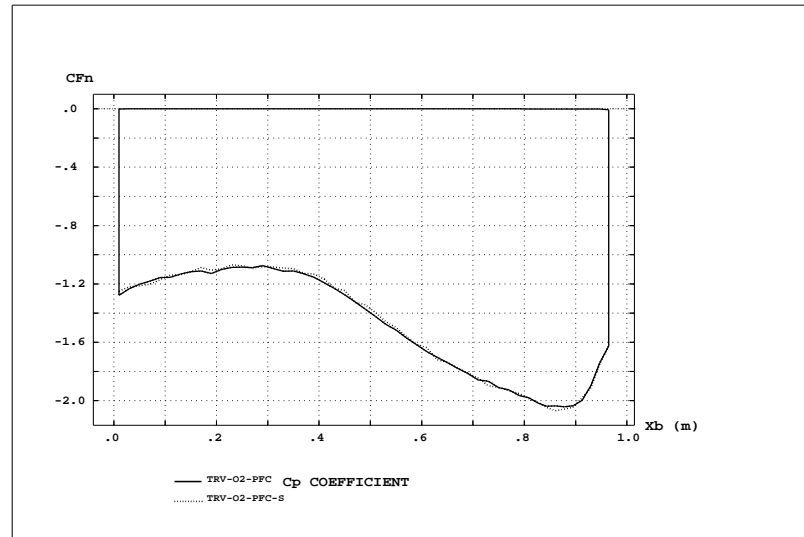


FIG. 15 - *Ecoulement d'oxygène autour d'une plaque avec déflecteur. Coefficient de pression obtenu par le code INRIA (trait plein) et par le code ITAM (trait pointillé).*

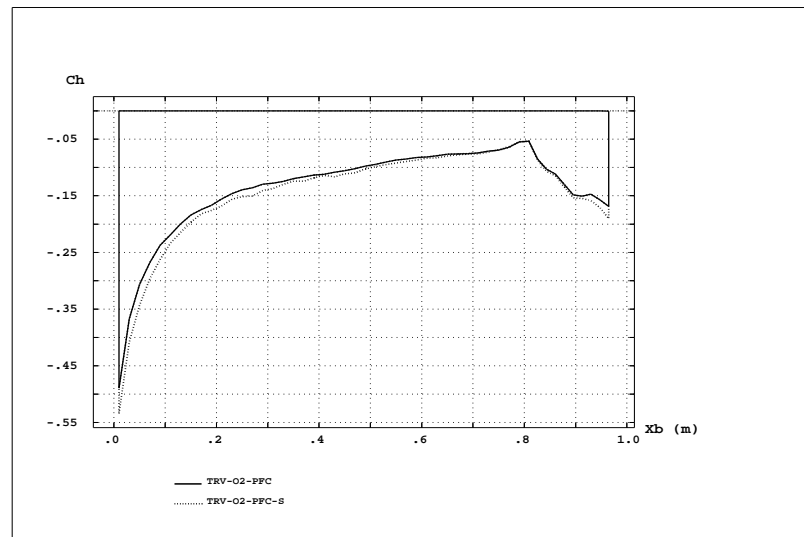


FIG. 16 - *Ecoulement d'oxygène autour d'une plaque avec déflecteur. Coefficient de chaleur obtenu par le code INRIA (trait plein) et par le code ITAM (trait pointillé).*

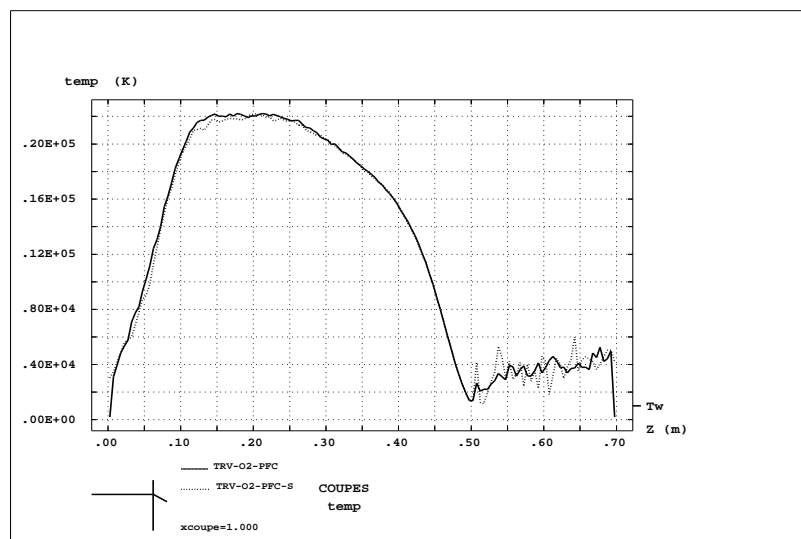


FIG. 17 - *Ecoulement d'oxygène autour d'une plaque avec déflecteur. Coupes transversale de la température moyenne ($x = 1.m$) obtenu par le code INRIA (trait plein) et par le code ITAM (trait pointillé).*

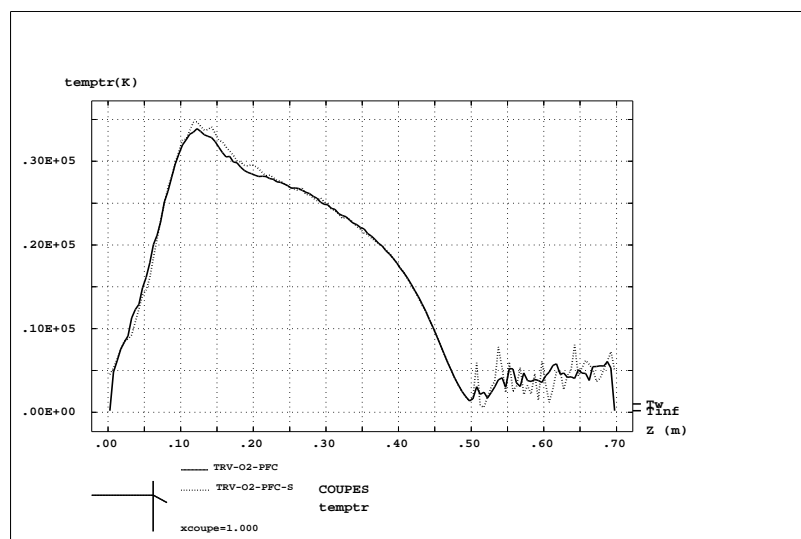


FIG. 18 - *Ecoulement d'oxygène autour d'une plaque avec déflecteur. Coupes transversale de la température de translation ($x = 1.m$) obtenu par le code INRIA (trait plein) et par le code ITAM (trait pointillé).*

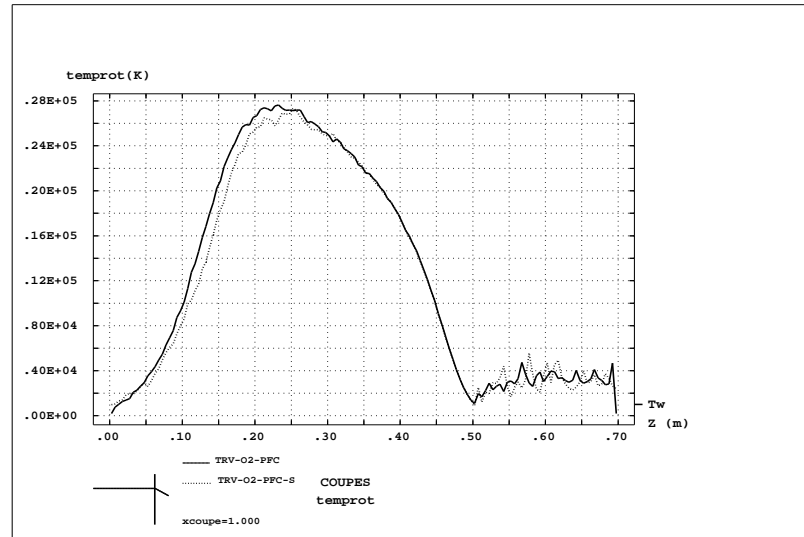


FIG. 19 - *Ecoulement d'oxygène autour d'une plaque avec déflecteur. Coupes transversale de la température de rotation ($x = 1.m$) obtenu par le code INRIA (trait plein) et par le code ITAM (trait pointillé).*

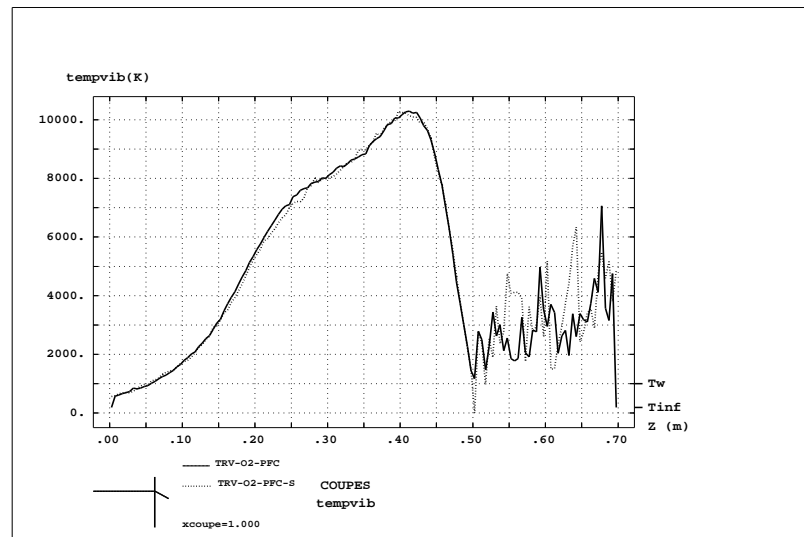


FIG. 20 - *Ecoulement d'oxygène autour d'une plaque avec déflecteur. Coupes transversale de la température de vibration ($x = 1.m$) obtenu par le code INRIA (trait plein) et par le code ITAM (trait pointillé).*

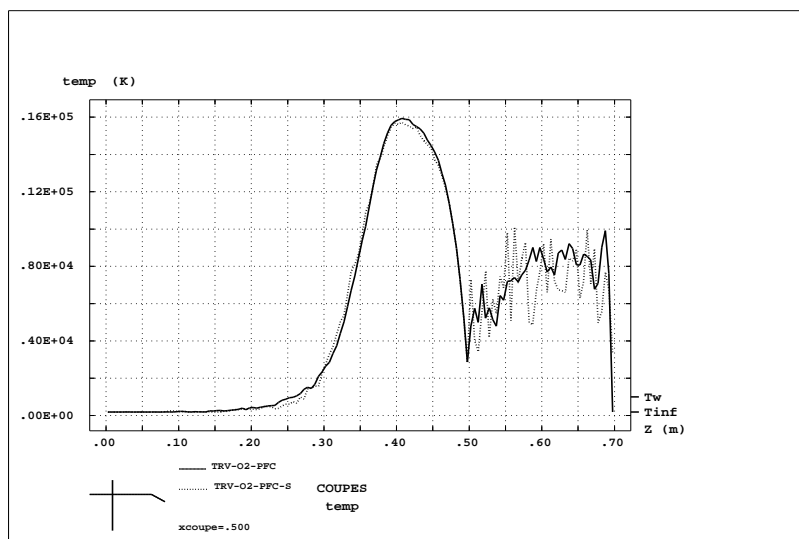


FIG. 21 - *Ecoulement d'oxygène autour d'une plaque avec déflecteur. Coupes transversale de la température moyenne ($x = 0.5m$) obtenu par le code INRIA (trait plein) et par le code ITAM (trait pointillé).*

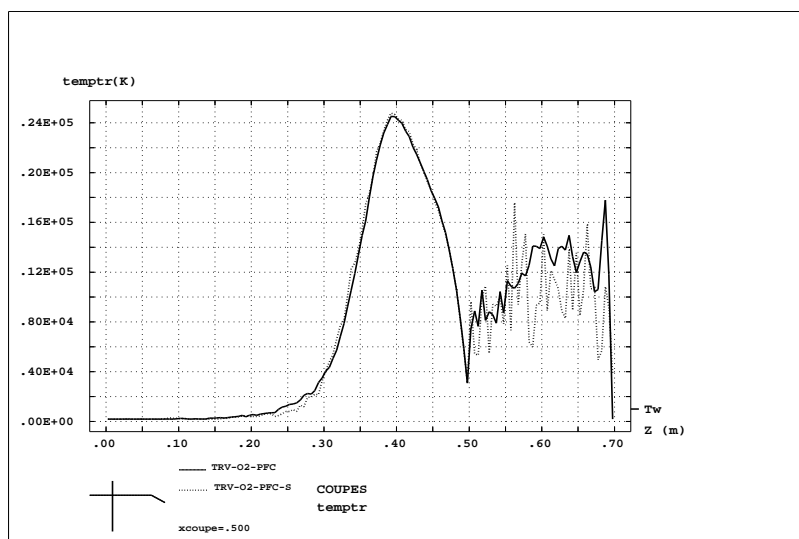


FIG. 22 - *Ecoulement d'oxygène autour d'une plaque avec déflecteur. Coupes transversale de la température de translation ($x = 0.5m$) obtenu par le code INRIA (trait plein) et par le code ITAM (trait pointillé).*

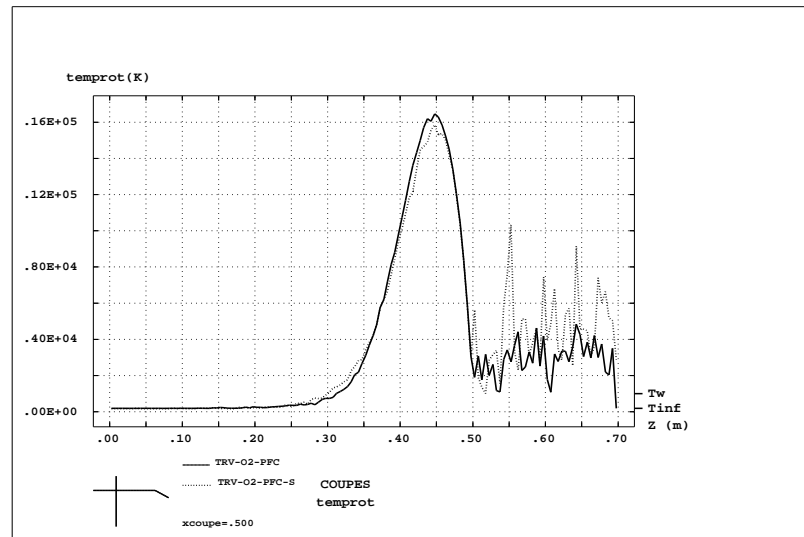


FIG. 23 - *Ecoulement d'oxygène autour d'une plaque avec déflecteur. Coupes transversale de la température de rotation ($x = 0.5m$) obtenu par le code INRIA (trait plein) et par le code ITAM (trait pointillé).*

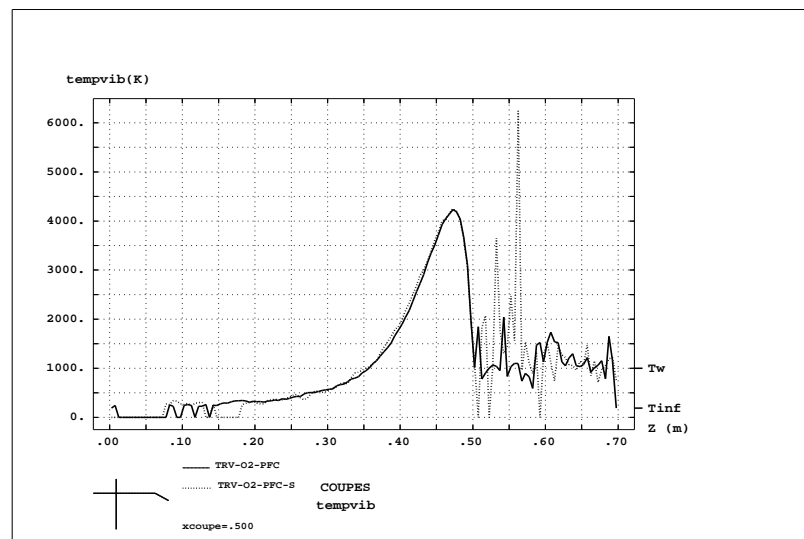


FIG. 24 - *Ecoulement d'oxygène autour d'une plaque avec déflecteur. Coupes transversale de la température de vibration ($x = 0.5m$) obtenu par le code INRIA (trait plein) et par le code ITAM (trait pointillé).*

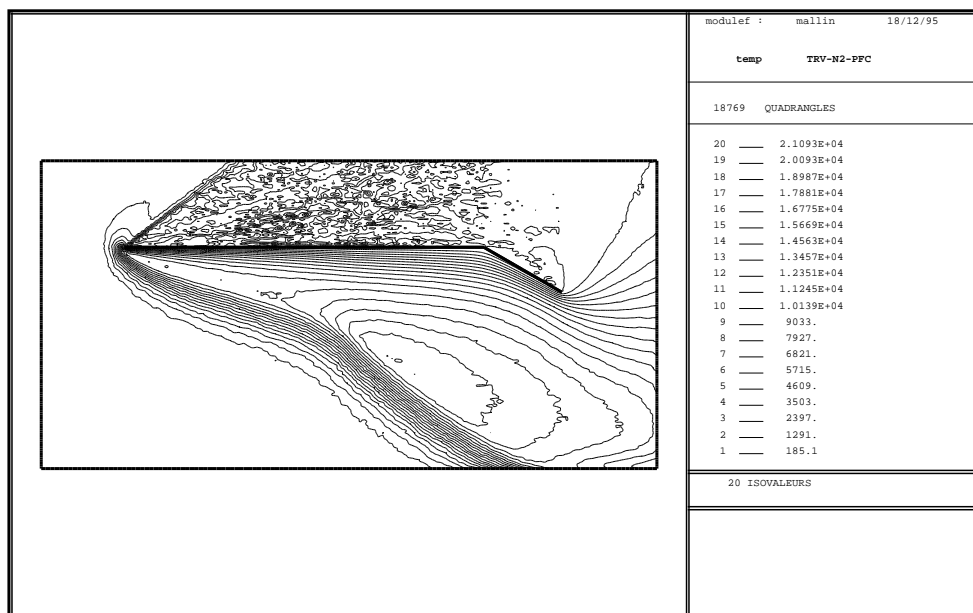


FIG. 25 - *Ecoulement d'azote autour d'une plaque avec déflecteur. Isolvaleurs de la température moyenne. Les oscillations au dessus de la plaque sont dues a un taux important de raréfaction du gaz.*

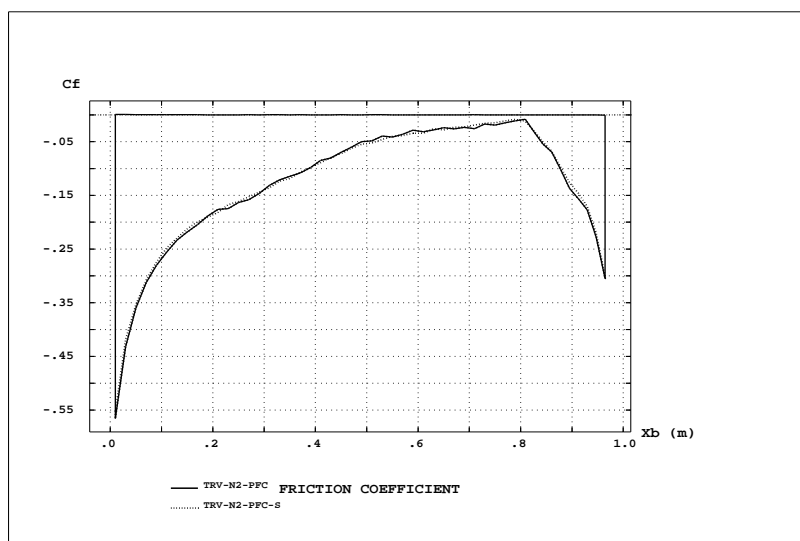


FIG. 26 - *Ecoulement d'azote autour d'une plaque avec déflecteur. Coefficient de friction obtenu par le code INRIA (trait plein) et par le code ITAM (trait pointillé).*

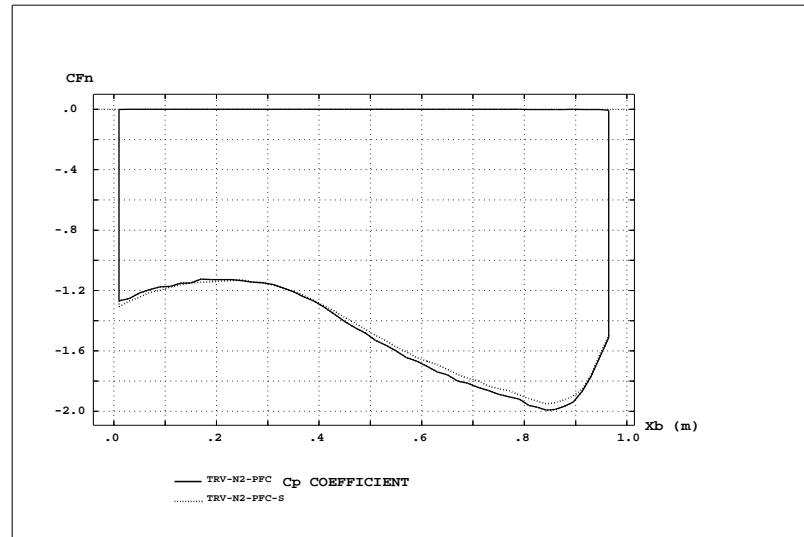


FIG. 27 - *Ecoulement d'azote autour d'une plaque avec déflecteur. Coefficient de pression obtenu par le code INRIA (trait plein) et par le code ITAM (trait pointillé).*

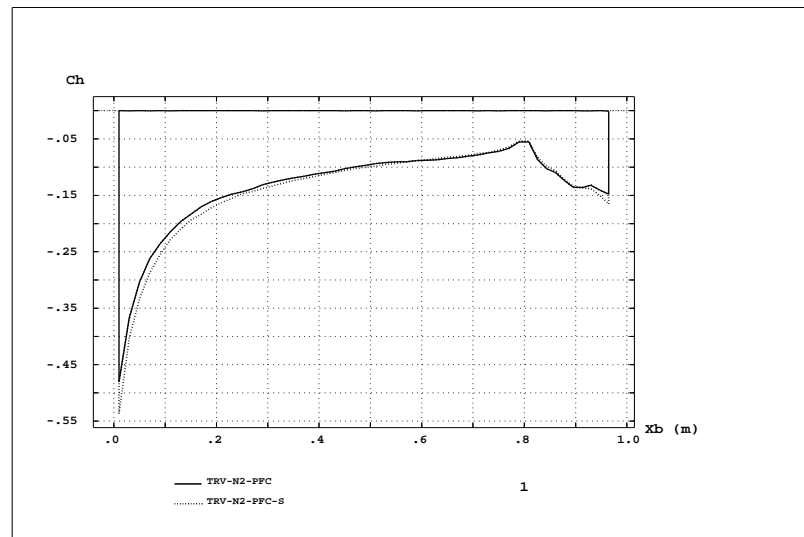


FIG. 28 - *Ecoulement d'azote autour d'une plaque avec déflecteur. Coefficient de chaleur obtenu par le code INRIA (trait plein) et par le code ITAM (trait pointillé).*

7 Probabilité d'échange d'énergie VV et probabilité de transition

Nous rappelons, dans cette partie, les sections efficaces pour ce nouveau modèle, desquelles découlent les probabilités d'échange d'énergie V-V.

Les collisions sont classées en trois groupes selon le paramètre adiabatique λ_k , donné par

$$(64) \quad \lambda_{\pm} = \frac{\omega_m^{\pm} \mu d}{p_m},$$

où

$$(65) \quad \omega_m^{\pm} = \frac{1}{2}(\omega_i^{\pm} + \omega_j^{\pm}),$$

$$(66) \quad \omega_k^{\pm} = |\omega_{1k} \pm \omega_{2k}|, \quad k = i, f,$$

$$(67) \quad \omega_{n_k} = \nu(1 - 2x_e(n_k + 0.5)),$$

$$(68) \quad p_m = \sqrt{\mu(E_i + E_f)},$$

$$(69) \quad p_k = \mu v_k,$$

$$(70) \quad v_k = \sqrt{\frac{2E_k}{\mu}},$$

i, f étant les indices de l'état initial et de l'état final, n_k le nombre quantique, v_k et E_k la vitesse et l'énergie de translation pour le niveau k , ω_e la fréquence de l'oscillateur, x_e un paramètre de non harmonicité (qui se déduit de la formule (42)), μ la masse réduite de la paire de particules qui entrent en collision, et d un paramètre du potentiel de Morse

Le paramètre λ^+ contrôle les transitions entre les niveaux d'énergie. Pour les gaz que nous considérons $\lambda^+ > 1$. Dans ce cas les collisions sont adiabatiques, c'est-à-dire que le temps de collision est plus grand que la période de l'oscillateur. Les règles de propensions adiabatiques déterminent alors le processus d'échange d'énergie. Ainsi les transitions vérifient

$$(71) \quad \Delta n_1 = -\Delta n_2,$$

où $\Delta n_k = n_{kf} - n_{ki}$. Cette relation signifie que le nombre quantique de vibration est un invariant collisionnel.

Le second paramètre d'adiabaticité, λ^- , permet de classer les collisions en trois groupes:

- collisions lentes

$$(72) \quad 1 < \lambda_1 < \lambda^-,$$

- collisions rapides

$$(73) \quad \lambda^- < \lambda_2 < 1,$$

- collisions modérées
- toutes les autres collisions.

Ci-dessus λ_1 et λ_2 sont des constantes.

Nous rappelons maintenant les sections efficaces pour les transitions d'un état (n_{1i}, n_{2i}) à un état (n_{1f}, n_{2f}) pour chaque type de collision.

Collisions lentes

$$(74) \quad \sigma_{n_{2i} \rightarrow n_{2f}}^{n_{1i} \rightarrow n_{1f}} = \frac{p_f}{p_i} \sigma_T P_{VV},$$

où σ_0 est la section efficace élastique totale correspondante, calculée pour $p = p_m$, et où

$$(75) \quad P_{VV} = \frac{A_{VV} \exp(-2\lambda^- \kappa_- \operatorname{tg}^{-1}(\sqrt{E_m/D}))}{\lambda^- \kappa_- \left(\operatorname{tg}^{-1}(\sqrt{E_m/D}) \frac{\sqrt{E_m/D}}{E_m/D+1} \right)},$$

$$(76) \quad \kappa_- = \frac{1}{2} |\Delta n_1 - \Delta n_2|,$$

$$(77) \quad A_{VV} = \frac{G_{VV}}{\Gamma^2(\kappa_- + 1)} \left(\frac{\pi d}{4h} \left[a_r \omega_m^- \mu d - (2a_a - a_r) \sqrt{2\mu D} \right] \right)^{2\kappa_-},$$

$$(78) \quad G_{VV} = \left(\frac{\varepsilon_{v1} \varepsilon_{v2}}{4} \right)^{\kappa_-}, \quad \varepsilon_{vq} = \frac{E_{vq}}{h\omega_{eq}}, \quad q = 1, 2.$$

Dans l'expression précédente, E_{vq} est l'énergie du mouvement interne de la particule.

Collisions rapides

$$(79) \quad \sigma_{n_{2i} \rightarrow n_{2f}}^{n_{1i} \rightarrow n_{1f}} = 2\pi d^2 \frac{p_f}{p_i} \int_{x_0}^{\infty} x \left(1 - \frac{D}{E_m} e^{-(x-x_{00})} (e^{-(x-x_{00})} (1-x) - 2+x) \right) (J_{\Delta_n}(|F(k, x)|))^2 dx,$$

où $J_m(x)$ est la fonction de Bessel, $x_0 = x_{00} - \lg(1 + \sqrt{1 + E_m/D})$, avec $x_{00} = R_0/d$ et

$$(80) \quad F(k, x) = \frac{Dd}{2v_m h} \sqrt{\pi x \varepsilon_{1m} \varepsilon_{2m}} e^{-(x-x_{00})} \left(a_1 e^{-(x-x_{00})} - 2\sqrt{2} a_2 \right),$$

$$(81) \quad \varepsilon_{qm} = \frac{E_{v1} + E_{v2}}{h\omega_{eq}} \quad q = 1, 2$$

et

$$(82) \quad v_m = \sqrt{\frac{2E_m}{\mu}} \quad E_m = \frac{1}{2}(E_i + E_f).$$

Collisions modérées

Dans ce cas la section efficace de collision est obtenue par interpolation des sections efficaces des collisions lentes et rapides.

7.1 Implémentation

Ici encore il serait trop honnête de calculer les sections efficaces de collision pour chaque collision dans le solveur DSMC. Par conséquent, des matrices contenant les probabilités de transition VV, sont calculées préalablement et utilisées comme données pour toute simulation. Un élément de la matrice de probabilité est notée $P_v(s, n_{1i}, n_{2i}, n_{1f}, i_g)$. Les notations utilisées sont les suivantes:

- $s = 1, 2, \dots, N_s$ représente le type d'interactions considérées. Elles s'écrivent de la manière suivante: $A(n_{1i}) + B(n_{2i}) \rightarrow A(n_{1f}) + B(n_{2f})$. s caractérise les espèces A et B ; N_s vaut 1 pour un gaz d'une espèce diatomique, 2 pour un mélange de deux espèces dont l'une est une molécule, etc.
- $n_{1i}, n_{2i} = 0, 1, \dots, n_{max}$ est le niveau de vibration avant collision, respectivement pour les particules 1 et 2. La valeur de n_{max} dépend de la molécule considérée. Pour l'azote, la valeur de n_{max} est 46.
- $i_g = 1, 2, \dots, N_g$ est l'indice de la matrice de probabilité correspondant à une vitesse relative v_i de la pair de particules qui entre en collision. On choisit préalablement une valeur maximale v_{max} de la vitesse relative ainsi qu'un nombre de subdivision N_g de l'intervalle $[0..v_{max}]$. Alors l'indice i_g , pour la vitesse v_i , est donné par la formule

$$(83) \quad i_g = \frac{N_g}{v_{max}} v_i + \frac{1}{2}.$$

- n_{1f} est le niveau d'énergie de vibration de la particule 1 après collision. Si n_{2f} désigne le niveau d'énergie de la particule 2 après la collision alors n_{1f} et n_{2f} doivent satisfaire les conditions suivantes

$$(84) \quad n_{1f} \in 0, 1, 2, \dots, n_{max} \quad \text{et} \quad n_{1f} \neq n_{1i}$$

et

$$(85) \quad n_{2f} \in 0, 1, 2, \dots, n_{max} \quad \text{et} \quad n_{2f} = n_{2i} - (n_{1f} - n_{1i}).$$

Alors la probabilité de transition s'écrit

$$(86) \quad P_v(s, n_{1i}, n_{2i}, n_{1f}, i_g) = \begin{cases} \frac{\sigma_{n_{2i} \rightarrow n_{2f}}^{n_{1i} \rightarrow n_{1f}}(v_i)}{\sigma_T(v_i)} & \text{si (84) et (85) sont vérifiées} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Pour (s, n_{1i}, n_{2i}, i_g) fixé, en sommant $P_v(s, n_{1i}, n_{2i}, n_{1f}, i_g)$ sur les indices n_{1f} , nous obtenons une nouvelle matrice $P_{vM}(s, n_{1i}, n_{2i}, i_g)$, qui exprime la probabilité de transition du état de vibration initial (n_{1i}, n_{2i}) à un quelconque état de vibration final (n_{1f}, n_{2f}) vérifiant les conditions (84) et (85). Un élément de cette matrice s'écrit

$$(87) \quad P_{vM}(s, n_{1i}, n_{2i}, i_g) = \sum_{n_{1f} \text{ vérifiant (84) et (85)}} P(s, n_{1i}, n_{2i}, n_{1f}, i_g).$$

Enfin, une nouvelle matrice P' est définie de la manière suivante

$$(88) \quad P'(s, n_{1i}, n_{2i}, n_{1f}, i_g) = \sum_{j=1}^{n_{1f}} \frac{P(s, n_{1i}, n_{2i}, j, i_g)}{P_M(s, n_{1i}, n_{2i}, i_g)}.$$

Sous cette forme la probabilité de transition croit de 0 à 1 quand n_{1f} augmente.

L'algorithme de la figure (29) détaille l'échange V-V lorsque deux particules ont été sélectionnées. L'algorithme global de collision, prenant en compte tous les types de collisions

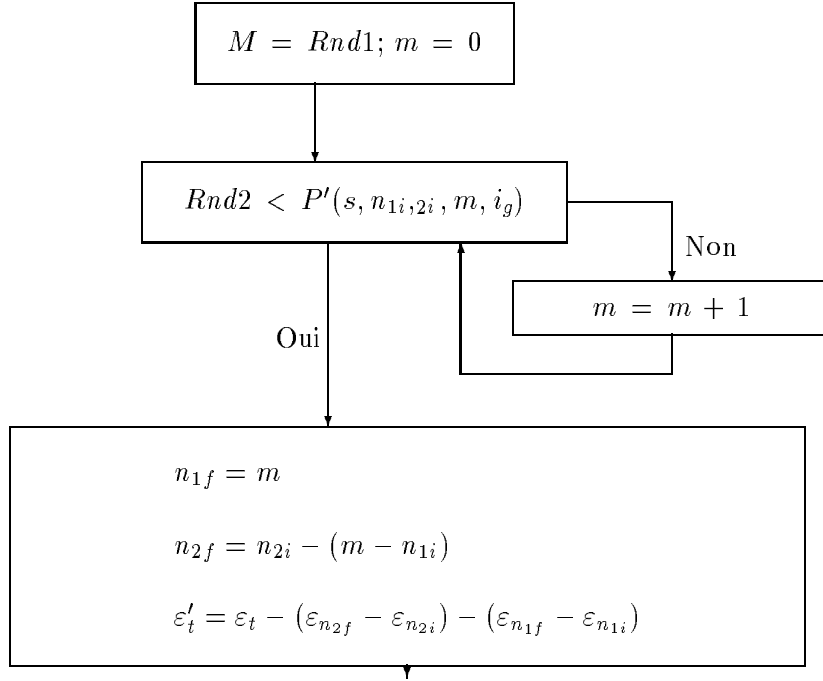
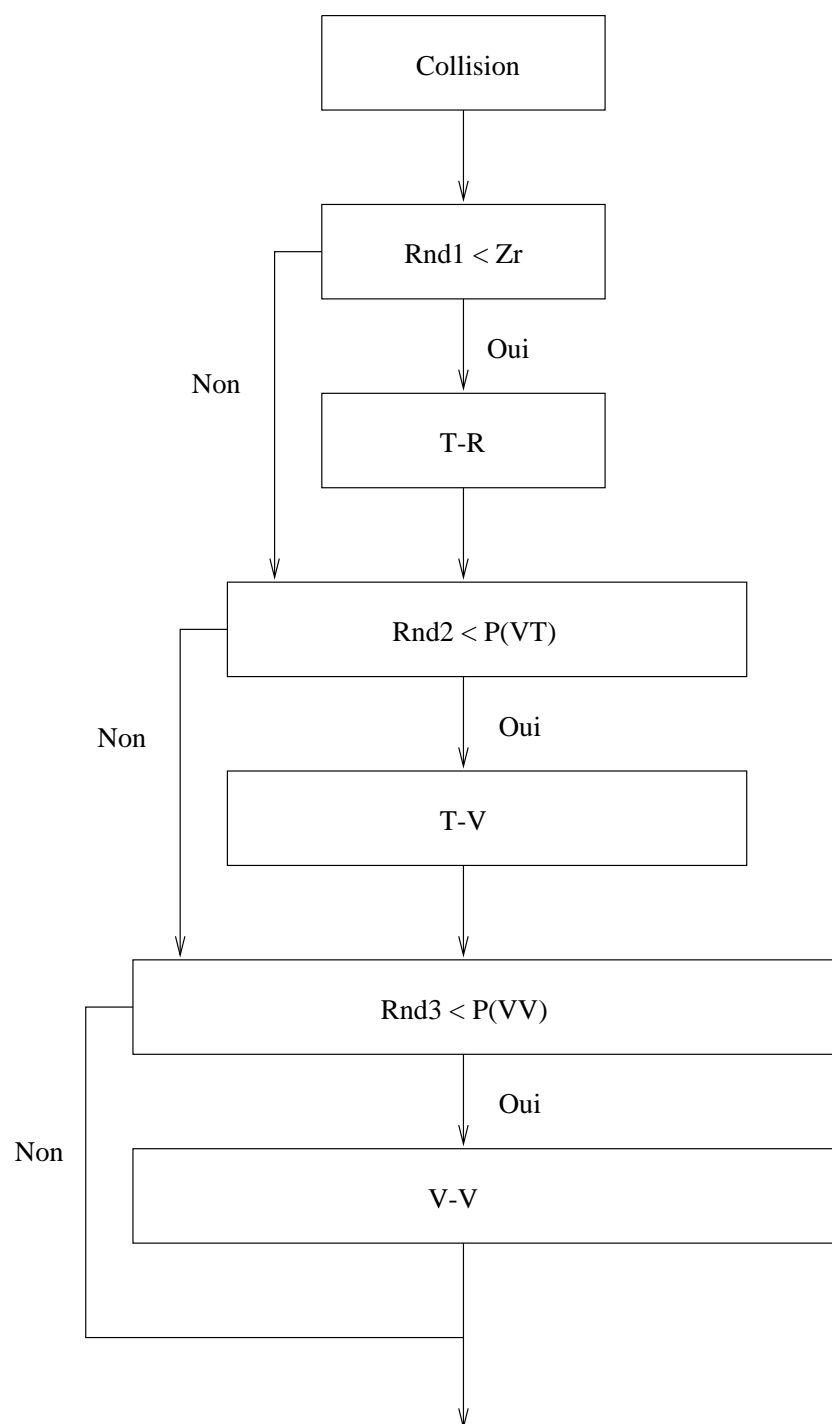


FIG. 29 - *Algorithme d'échange d'énergie dans une collision VV.*

décrits précédemment est représenté (30).

FIG. 30 - *Algorithme global de collision.*

7.2 Résultats numériques

Relaxation adiabatique dans une boîte

Nous considérons un gaz formé de molécules d'oxygène. Les températures initiales de translation et de rotation sont égales à 20000K, et la température initiale de vibration est égale à 0. La figure (31) représente la relaxation des différentes températures dans le cas où l'on ne considère que des échanges VT et dans le cas où l'on considère des échanges VT et VV. Nous remarquons que l'introduction du nouveau modèle ne modifie pas sensiblement la relaxation.

Écoulement autour d'une plaque avec déflecteur

Nous considérons un gaz mono espèce, constitué de molécules d'oxygène.

Les paramètres de l'écoulement et les données concernant la géométrie sont ceux donnés au paragraphe 6-3.

Toutes les grandeurs que nous présentons sur les différentes figures, calculées à partir des modèles d'échanges d'énergie V-T et V-V, sont comparées à celles calculées en ne prenant en compte que les échanges d'énergie V-T pour le mode de vibration.

Les figures (32), (33) et (34) représentent respectivement les coefficients de friction, de pression et de chaleur, dont les expressions sont rappelées ci-dessous

$$C_f = \frac{(\sigma \cdot n) \cdot \tau}{0.5 \rho_\infty u_\infty^2}, \quad C_p = \frac{(\sigma \cdot n) \cdot n}{0.5 \rho_\infty u_\infty^2}, \quad C_h = \frac{(q \cdot n)}{0.5 \rho_\infty u_\infty^3}.$$

Nous constatons que les solutions sont très similaires.

Les iso valeurs des températures de translation, de rotation et de vibration sont représentées respectivement sur les figures (35), (36) et (37). Les figures (38), (39) et (40) montrent différentes sections transversales à la plaque des différentes températures. La longueur de la plaque (sans le déflecteur) est de 0.8m; les sections sont considérées aux abscisses 0.8 et 1.1. Comme pour les coefficients on remarque que les températures obtenues avec ou sans l'introduction du modèle d'échange d'énergie V-V sont très similaires.

Enfin, les coefficients à la paroi sont comparés avec ceux obtenus par le modèle de Borgnakke-Larsen discret [19], [2], [6]. Ce modèle considère des énergies de vibration et de rotation discrètes. Les résultats sont très voisins pour les coefficients de friction et de chaleur. Une différence sensible apparaît pour le coefficient de pression au niveau du déflecteur.

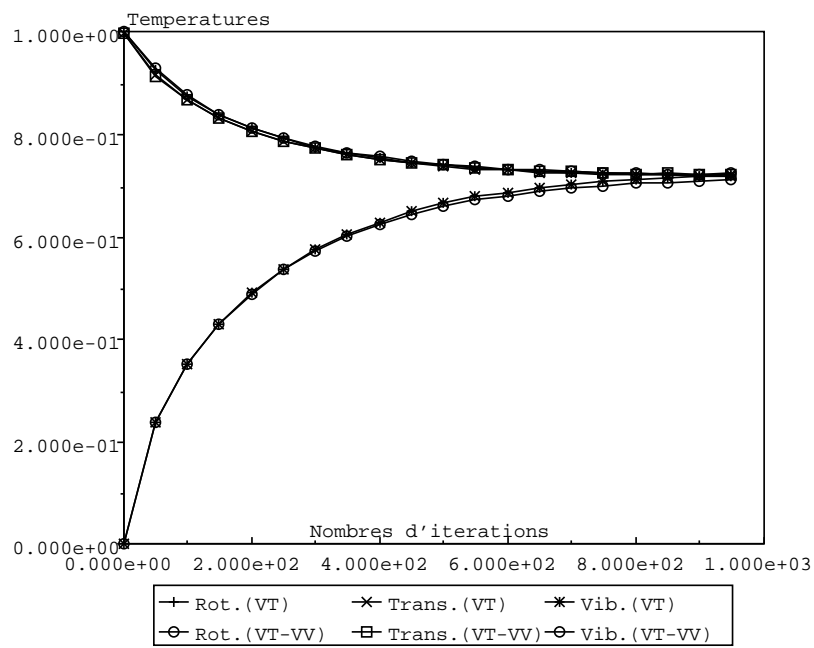


FIG. 31 - Relaxation adiabatique dans le cas d'échanges (VT) d'une part et (VT)-(VV) d'autre part.

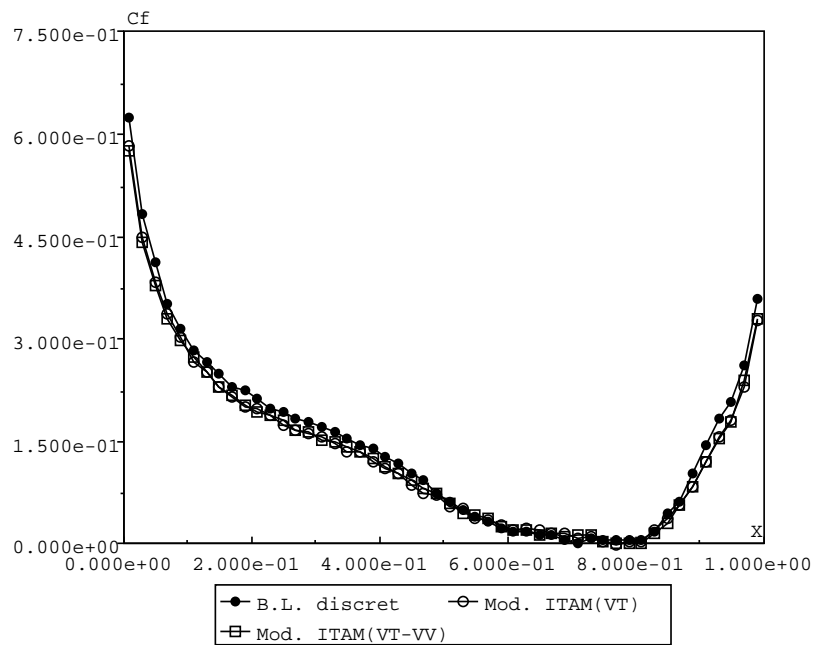


FIG. 32 - Coefficient de friction C_f obtenu avec le modèle de Borgnakke-Larsen discret, avec le modèle d'échange V-T et avec les modèles V-T et V-V.

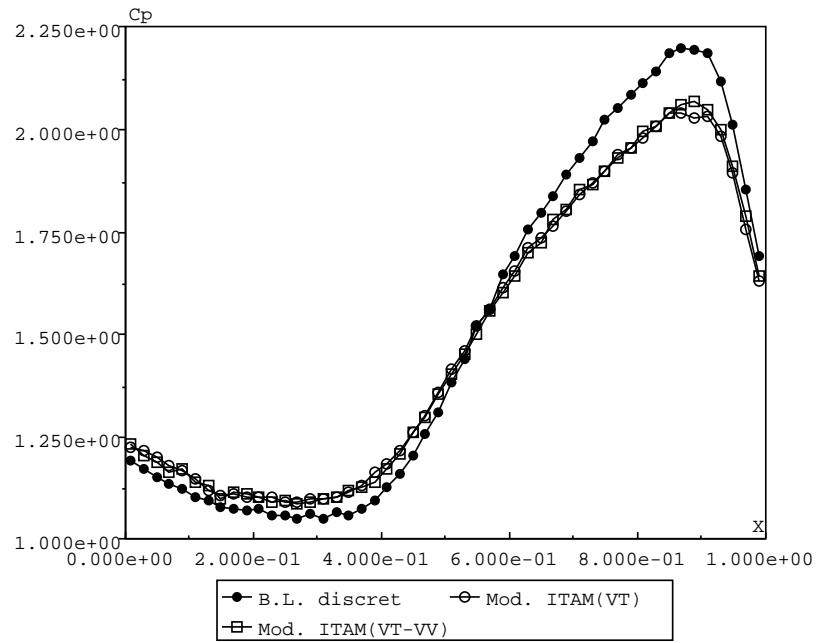


FIG. 33 - Coefficient de pression C_p obtenu avec le modèle de Borgnakke-Larsen discret, avec le modèle d'échange V-T et avec les modèles V-T et V-V.

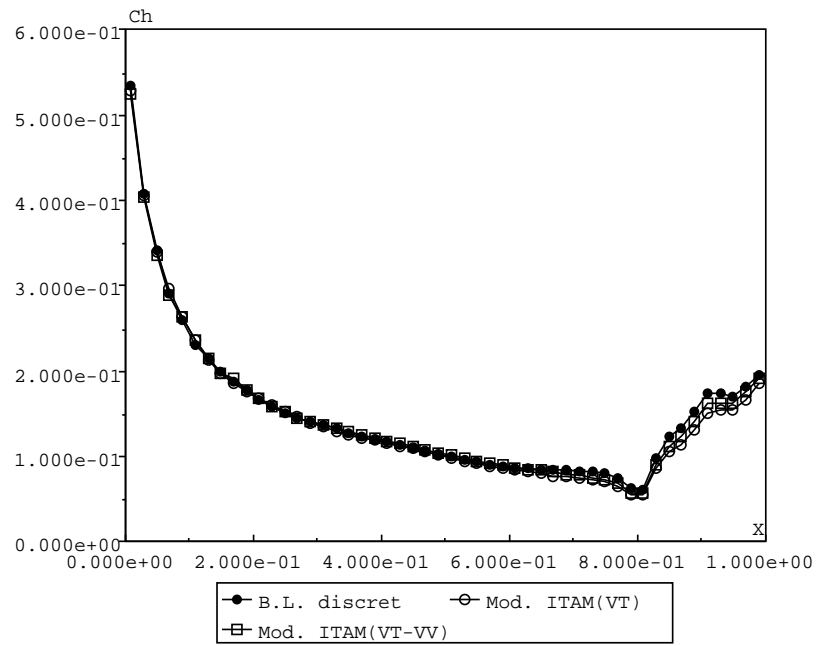


FIG. 34 - Coefficient de chaleur C_h obtenu avec le modèle de Borgnakke-Larsen discret, avec le modèle d'échange V-T et avec les modèles V-T et V-V.

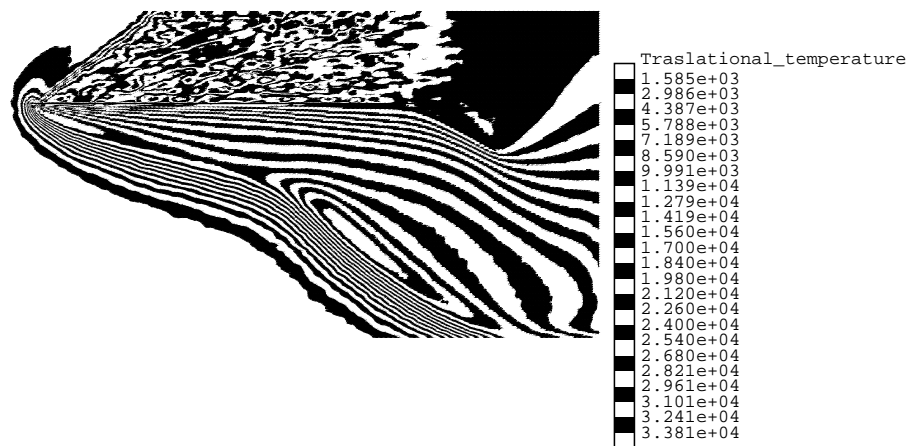


FIG. 35 - Iso valeurs de la température de translation avec les modèles V-T et V-V.

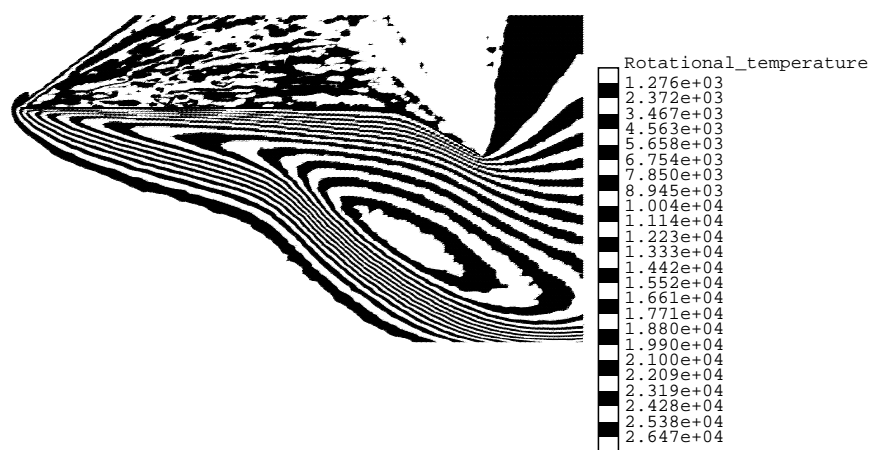


FIG. 36 - Iso valeurs de la température de rotation avec les modèles V-T et V-V.

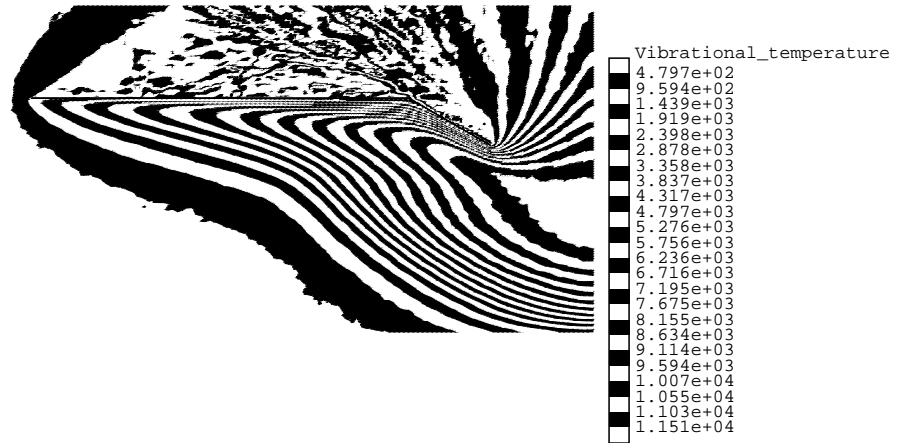


FIG. 37 - Iso valeurs de la température de vibration avec les modèles V-T et V-V.

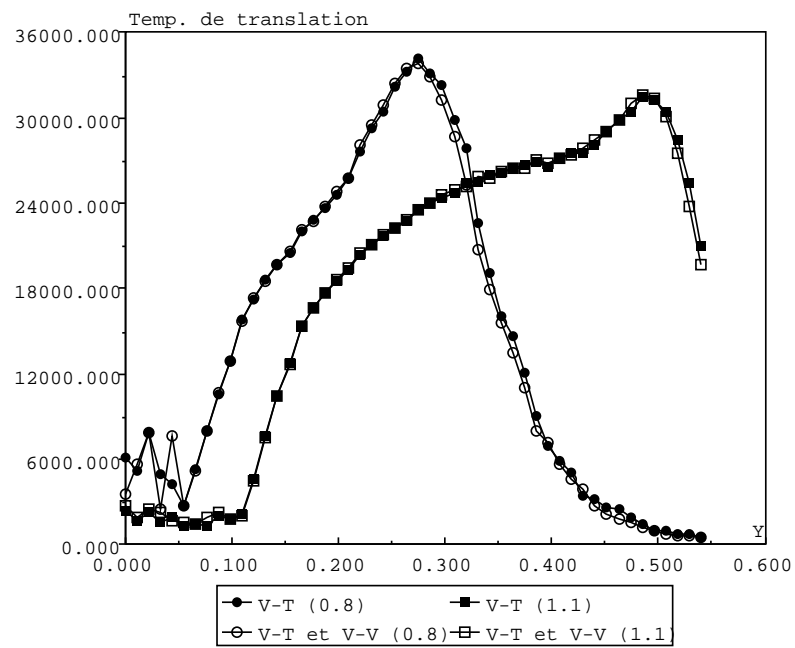


FIG. 38 - Coupes de la température de translation.

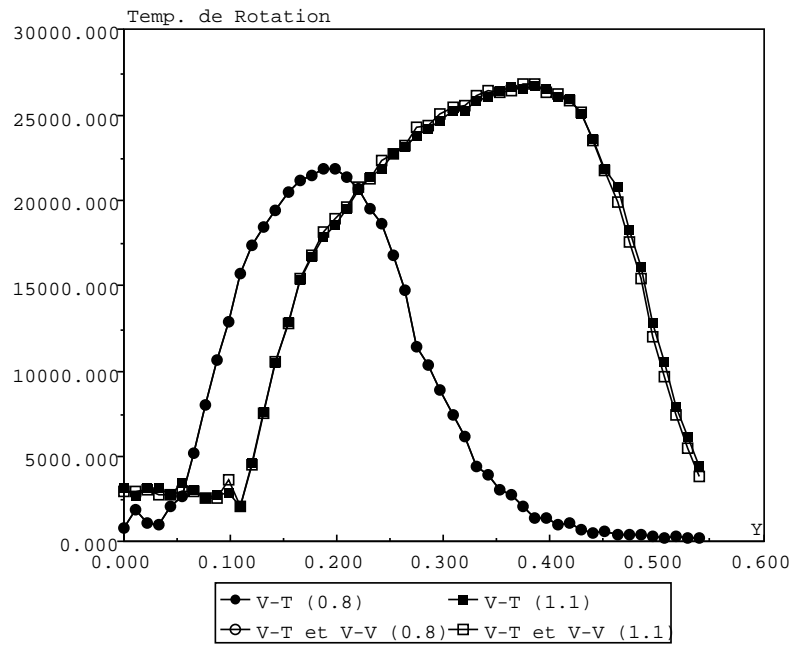


FIG. 39 - Coupes de la température de rotation.

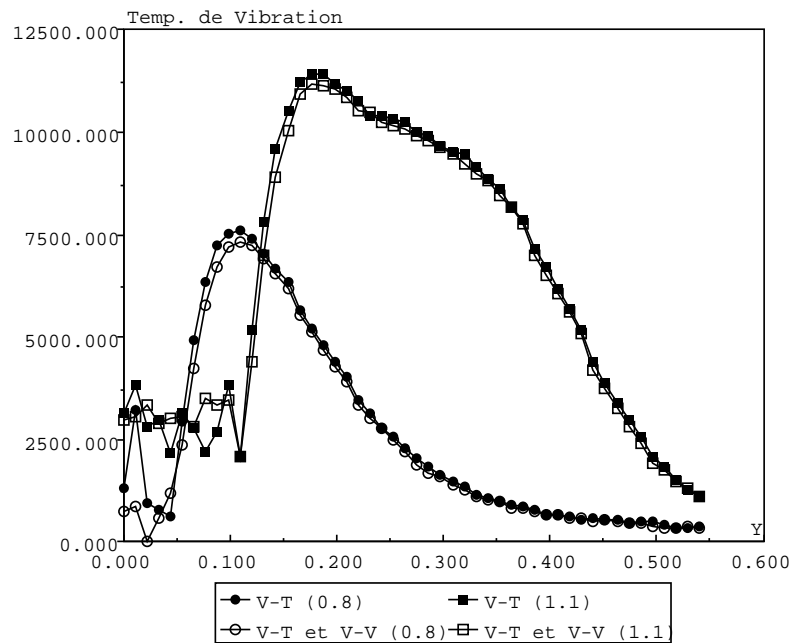


FIG. 40 - Coupes de la température de vibration.

8 Conclusion

Nous avons présenté dans ce papier le solveur Boltzmann que nous utilisons à l'INRIA. En particulier, nous avons décrit l'approximation numérique de l'équation de Boltzmann dont découle l'algorithme implémenté. De plus nous avons précisé le modèle d'échange d'énergie T-R de Borgnakke-Larsen et introduit un nouveau modèle pour les échanges d'énergie T-V et V-V, ainsi que les probabilités pour que de tels échanges se produisent. L'implémentation de ce modèle a été validée pour des écoulements d'oxygène et d'azote dans le cas homogène et autour d'une plaque munie d'un déflecteur avec une forte incidence. L'introduction d'un modèle T-V est nécessaire pour les écoulements à hautes températures. La comparaison entre des solutions prenant en compte ou non le modèle V-V, pour le cas test proposé, montre que son importance est négligeable.

Références

- [1] H. Babovsky, "On a simulation scheme for the Boltzmann equation", *Math. Mech. in the Appl. Sci.*, Vol. 8, 1986.
- [2] F. Bergemann, I. Boyd, "New discrete vibrational energy model for the direct simulation Monte Carlo method," *In Rarefied Gas Dynamics: Experimental techniques and physical systems*, volume 158, 1994.
- [3] G. A. Bird, "Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows", *Clarendon Press Oxford*, 1994.
- [4] A.V. Bogdanov, G.V. Dubrovskii, Yu.E. Gorbachev, V.M. Strelchenya, "Theory of vibrational and rotational excitation of polyatomic molecules".
- [5] J. Bourgat, L. Desvillettes, P. Le Tallec, B. Perthame, "Microreversible collisions for polyatomic gases and Boltzmann's theorem", *Eur. J. Mech.*, B/Fluids, 13, no2, 1994.
- [6] I. Boyd, "Relaxation of discrete rotational energy distributions using a Monte Carlo method", *Phys. Fluids*, A 5 (9), September 1993.
- [7] R. Brun, "Transport et relaxation dans les écoulements gazeux", *Masson*, 1986.
- [8] C. Cercignani, "The Boltzmann equation and its applications", *Springer-Verlag*, 1975.
- [9] C. Cercignani, "Mathematical Method in Kinetic Theory", *Mac Millan*, 1969.
- [10] S. Chapman, T.G. Colling, "The mathematical theory of non uniform gases", *Cambridge Univ. Press*, 1990.
- [11] S.E. Gimelshein, M.S. Ivanov, A.V. Kashkovsky, Yu.E. Gorbachev, "Real gas effects on the aerodynamics of 2D concave bodies in the transitional regime", *Rarefied Gas Dynamics, Proceedings of the 19th international symposium held at the university of Oxford*, 25-29 July 1994
- [12] B. Haas, D. Hash, G. Bird, F. Lumpkin, H. Hassen, "Rates of thermal relaxation in direct simulation Monte Carlo methods", *Phys. Fluids*, 6(6), June 1994.

- [13] C. N. Hinshelwood, "The kinetic of chemical change", *Clarenton Press Oxford*, page39, 1940.
- [14] J. O. Hirschfelder, C. F. Curtiss, R. B. Bird, "Molecular theory of gases and liquids", *John Wiley and Sons, Inc.*, 1954.
- [15] M.S. Ivanov, S.G. Antonov, S.E. Gimelshein, A.V. Kashkovsky, G.N. Markelov, "Statistical simulations of hypersonic flows about concave bodies in transitional regime", *ICAR, International Center of Aerodynamics Research*, N-8, 1994.
- [16] M.S. Ivanov, S.F. Gimelshein, A.V. Kashkovsky, G.N. Markelov, "Models and numerical schemes of the DSMC method for simulation of chemically reacting rarefied gas flows", *communication privée, contract DRET, Sous projet 4*.
- [17] M.N. Kogan, "Rarefied Gas Dynamics", *Plenom Press*, New-York, 1969.
- [18] F.E. Lumpkin, B.L. Hass, I.D. Boyd, "Solution of difference between collision number definitions in particle and continuum simulations", *Phys. Fluids*, A 3(9), 1991.
- [19] S. Gimelshein, F. Mallinger, "Implémentation d'un modèle de collision pour des énergies de rotation et de vibration discrètes-Temps de relaxation.", *Rapport interne INRIA* 20 Janvier 1997.
- [20] K. Nanbu, "Stochastic solution method of the master equation and the model Boltzmann equation ", *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 52, N-o 8, August 1983.
- [21] K. Nanbu, "Direct simulation scheme derived from the Boltzmann equation. I. Mono-component gases", *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 49, N-o 5, November 1980.
- [22] J.G. Parker, "Rotational and vibrational relaxation in diatomic gases", *Phys. Fluids*, Vol.2, No.4, 1959.
- [23] Vicenti, Kruger, "Introduction to Physical Gas Dynamics", *Krieger*,1986.

ANNEXE: Le modèle de Borgnakke-Larsen discret

Pour le modèle que nous présentons maintenant les énergies de rotation et de vibration sont quantifiées. Les échanges d'énergie T-R et T-V suivent le modèle de Borgnakke-Larsen, modifié pour la prise en compte du spectre discret des modes de rotation et de vibration. Afin d'obtenir une relaxation compatible avec celle donnée par le modèle de Landau Teller, nous avons implémenté des probabilités de relaxation adéquates, ainsi que la méthode de sélection par particules sans doubles relaxation [12], [18].

Énergie de rotation: Le modèle du rotor

La modélisation d'une molécule diatomique par le modèle du rotor introduit une quantification des niveaux d'énergie de rotation. Ainsi, l'énergie du niveau j est donnée par l'équation

$$(89) \quad \varepsilon_r(j) = j(j+1)k\theta_r \left(1 - 4\chi_r \left(\frac{\theta_r}{\theta_v} \right)^2 j(j+1) \right),$$

où k est la constante de Boltzmann, θ_r et θ_v les températures caractéristiques de rotation et de vibration et χ_r un paramètre variant de 0 à 1. Pour $\chi_r = 0$, nous retrouvons le cas du rotor rigide. Pour que le modèle soit plus réaliste, on définit un niveau d'énergie maximum j_{max} de telle sorte que $\varepsilon_r(j_{max}) \leq \varepsilon_{dis}$, où ε_{dis} est l'énergie de dissociation de la molécule. La distribution d'énergie de rotation à l'équilibre s'écrit, en tenant compte de la dégénérescence des niveaux,

$$(90) \quad f_r(j) = \frac{(2j+1)\exp\left(-\frac{\varepsilon_r(j)}{kT}\right)}{Q_r},$$

où Q_r est la fonction de partition associée à l'énergie de rotation, définie par

$$(91) \quad Q_r = \sum_i (2j+1)\exp\left(-\frac{\varepsilon_r(j)}{kT}\right),$$

T représentant la température d'équilibre. Remarquons que dans le cas où $\chi_r = 0$, et pour une somme infinie, la fonction de partition vaut θ_r/T . Il est nécessaire d'utiliser une méthode d'acceptation rejet pour tirer, selon la distribution f_r , le niveau d'énergie de rotation d'une particule. La distribution des niveaux d'énergie à l'infinie est donnée par f_r , en remplaçant T par T_∞ et à la paroi, en remplaçant T par T_p .

Nous devons encore définir la probabilité conjointe. Celle-ci permet de tirer le niveau d'énergie d'une particule qui relaxe le mode de rotation après une collision. Dans ce but, Boyd [6] utilise le schéma de Borgnakke-Larsen, modifié pour prendre en compte le caractère discret de l'énergie de rotation. La distribution est alors réécrite en introduisant une masse de Dirac, comme le montre l'équation suivante

$$(92) \quad f_r(\varepsilon_r, j) = \frac{1}{Q_r} (2j+1) \exp\left(-\frac{\varepsilon_r}{kT}\right) \delta\left(\frac{\varepsilon_r}{kT} - \frac{\varepsilon_r(j)}{kT}\right).$$

Nous supposons, dans la formule (92), que Q_r est finie. D'autre part, la distribution d'énergie de translation associée à la paire de particules qui entrent en collision, s'écrit, pour le

modèle VHS,

$$(93) \quad f_t(\varepsilon_t) = \frac{1}{\Gamma(2-\omega)} \left(\frac{\varepsilon_t}{kT} \right)^{1-\omega} \exp\left(-\frac{\varepsilon_t}{kT}\right),$$

où ω est lié à la section efficace de collision σ , par la relation

$$(94) \quad \sigma \propto g^{-2\omega},$$

($\omega = 0$ pour le modèle HS), et

$$(95) \quad \varepsilon_t = \frac{1}{2}\mu g^2,$$

est l'énergie de translation relative. Dans la formule précédente, μ est la masse réduite et g la vitesse relative de la paire de particules qui entrent en collision. La distribution conjointe est alors obtenue par la formule suivante

$$(96) \quad f_r(j', \varepsilon_c) = \int_0^{\varepsilon_c} f_t(\varepsilon'_t = \varepsilon_c - \varepsilon'_r) f_r(\varepsilon'_r, j') d\varepsilon'_r,$$

où $\varepsilon_c = \varepsilon_t + \varepsilon_r = \varepsilon'_t + \varepsilon'_r$ est invariant dans la collision. Notons qu'une seule des deux particules qui entrent en collision relaxe l'énergie de rotation et par conséquent échange de l'énergie avec le mode de translation. Après calcul de l'intégrale, on obtient

$$(97) \quad f_r(j', \varepsilon_c) = \frac{1}{\Gamma(2-\omega)} \frac{1}{Q_r} (2j' + 1) \left(\frac{\varepsilon_c - \varepsilon_r(j')}{kT} \right)^{1-\omega} \exp\left(-\frac{\varepsilon_c}{kT}\right).$$

En supposant l'équilibre thermodynamique local, il résulte que T est une constante. De même, l'énergie totale ε_c de la paire est une constante dans la collision. On peut donc tirer le niveau d'énergie j' de la particule après collision en utilisant la distribution

$$(98) \quad g_r(j', \varepsilon_c) \propto (2j' + 1)(\varepsilon_c - \varepsilon_r(j'))^{1-\omega}.$$

La distribution normalisée g'_r correspondante s'écrit

$$(99) \quad g'_r(j', \varepsilon_c) = \frac{g_r}{g_{r,max}} = \frac{(2j' + 1)(\varepsilon_c - \varepsilon_r(j'))^{1-\omega}}{(2J' + 1)(\varepsilon_c - \varepsilon_r(J'))^{1-\omega}},$$

où

$$(100) \quad J' = \frac{1}{2} \left[-1 + \sqrt{\frac{1}{3-2\omega} \left(\frac{4\varepsilon_c}{k\theta_r} + 1 \right)} \right].$$

On utilise ensuite une méthode d'acceptation rejet pour tirer j' selon la distribution de probabilité g'_r .

Énergie de vibration: le modèle de l'oscillateur

Dans le cas de l'oscillateur les niveaux d'énergie de vibration sont également quantifiés, et sont donnés par

$$(101) \quad \varepsilon_v(j) = \left(j + \frac{1}{2} \right) k\theta_v \left[1 - \chi_v \frac{k\theta_v}{4\varepsilon_{dis}} \left(j + \frac{1}{2} \right) \right],$$

où ε_{dis} est l'énergie de dissociation de la particule et χ_v un paramètre de non harmonicité de l'oscillateur variant de 0 à 1. Pour $\chi_v = 1$ on retrouve les niveaux d'énergie de l'oscillateur harmonique.

La distribution des niveaux d'énergie à l'équilibre est donnée par la formule

$$(102) \quad f_v(j) = \frac{\exp\left(-\frac{\varepsilon_v(j)}{kT}\right)}{Q_v},$$

où Q_v est la fonction de partition, qui s'écrit

$$(103) \quad Q_v = \sum_i \exp\left(-\frac{\varepsilon_v(i)}{kT}\right).$$

Cette fonction de distribution permet de tirer les niveaux d'énergie des particules après une collision avec une paroi et les niveaux d'énergie des particules à l'infini.

Ici encore, lors d'une collision, une seule des particules est sélectionnée pour échanger de l'énergie avec le mode de translation. La distribution conjointe qui permet de tirer le niveau d'énergie de la particule après collision est encore obtenue par le schéma de Borgnakke-Larsen modifié. Dans ce cas la distribution d'énergie de vibration, modifiée par l'introduction d'une masse de Dirac [2], s'écrit

$$(104) \quad f_v(\varepsilon_v, j) = \frac{1}{Q_v} \exp\left(-\frac{\varepsilon_v}{kT}\right) \delta\left(\frac{\varepsilon_v}{kT} - \frac{\varepsilon_v(j)}{kT}\right).$$

La distribution conjointe est alors donnée par la formule intégrale suivante

$$(105) \quad f_v(j', \varepsilon_c) = \int_0^{\varepsilon_c} f_t(\varepsilon'_t = \varepsilon_c - \varepsilon'_v) f_v(\varepsilon'_v, j') d\varepsilon'_v,$$

où f_t est la distribution d'énergie (93) du centre de masse, et $\varepsilon_c = \varepsilon_t + \varepsilon_v = \varepsilon'_t + \varepsilon'_v$ l'énergie totale, invariante dans la collision. Après calcul, la fonction de distribution normalisée g'_v est donnée par

$$(106) \quad g'_v(j', \varepsilon_c) = \left(1 - \frac{\varepsilon_v(j')}{\varepsilon_c}\right)^{1-\omega}.$$

Finalement l'implémentation de cette formule utilise une méthode d'acceptation rejet



Unité de recherche INRIA Lorraine, Technopôle de Nancy-Brabois, Campus scientifique,
615 rue du Jardin Botanique, BP 101, 54600 VILLERS LÈS NANCY
Unité de recherche INRIA Rennes, Irisa, Campus universitaire de Beaulieu, 35042 RENNES Cedex
Unité de recherche INRIA Rhône-Alpes, 655, avenue de l'Europe, 38330 MONTBONNOT ST MARTIN
Unité de recherche INRIA Rocquencourt, Domaine de Voluceau, Rocquencourt, BP 105, 78153 LE CHESNAY Cedex
Unité de recherche INRIA Sophia-Antipolis, 2004 route des Lucioles, BP 93, 06902 SOPHIA-ANTIPOLIS Cedex

Éditeur
INRIA, Domaine de Voluceau, Rocquencourt, BP 105, 78153 LE CHESNAY Cedex (France)
ISSN 0249-6399